

●巻頭言

「研究評価」と「論文出版」

福山 秀敏 [東京理科大学]

●レターズ

分子研ネットワークによる創発

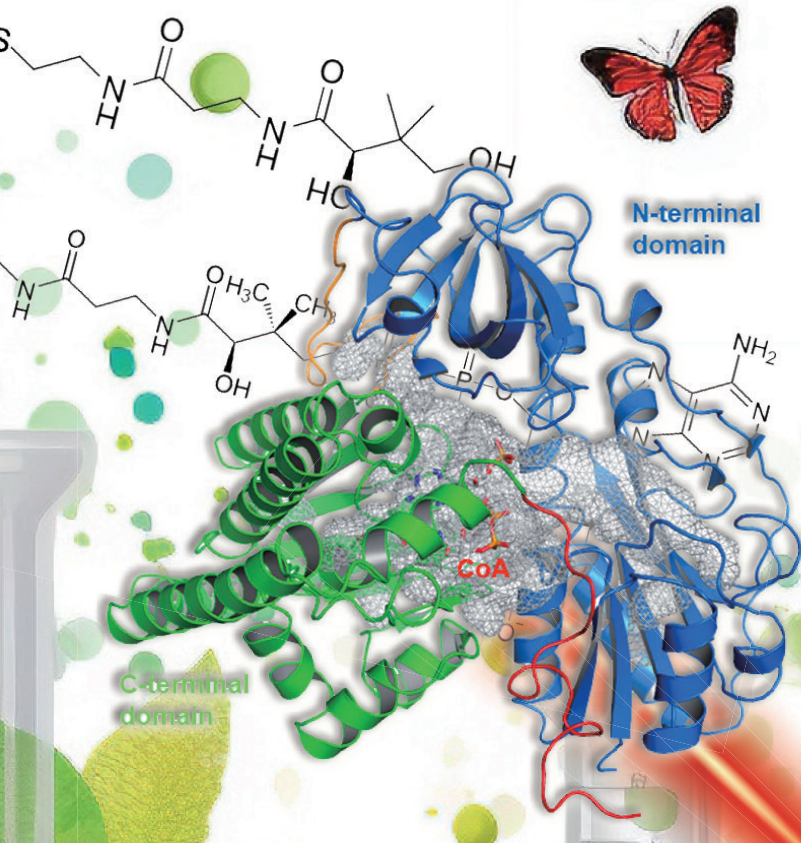
君塚 信夫 [九州大学大学院工学研究院 主幹教授]

●分子科学の最先端

遷移金属イオンと ガス分子の協奏による 生理機能制御

青野 重利

[自然科学研究機構 生命創成探究センター・
分子科学研究所 教授]



共同利用研究ハイライト

ヘムタンパク質におけるヘムの多機能性の起源の解明に向けた深層学習による
ヘムタンパク質ポケット構造からの機能予測

鷹野 優 [広島市立大学大学院情報科学研究科 教授]

液体の統計力学理論による生体分子の機能解析

吉田 紀生 [名古屋大学大学院情報学研究科 教授]

層状物質の放射光角度分解光電子分光 (ARPES)

田中 慎一郎 [大阪大学産業科学研究所 准教授]

巻頭言

01 「研究評価」と「論文出版」

● 福山 秀敏 [東京理科大学]

レターズ

02 分子研ネットワークによる創発

● 君塚 信夫 [九州大学大学院工学研究院応用化学部門 主幹教授]

分子科学の最先端

05 遷移金属イオンとガス分子の協奏による生理機能制御

● 青野 重利 [自然科学研究機構 生命創成探究センター・分子科学研究所 教授]

IMSニュース

- 8 UVSOR40周年記念行事報告
- 8 放射光60周年記念シンポジウム報告
- 10 事業報告
- 13 国際事業報告
- 15 受賞者の声——小林 稜平
- 15 分子科学研究所50周年のご案内

IMSカフェ

- 16 分子研出身者の今——上野 隆史、山根 宏之、嘉治 寿彦、宇理須 恒雄
- 22 分子研出身者の今 受賞報告——小林 速男、郭 磊
- 23 分子研を去るにあたり
- 26 外国人研究職員の印象記
- 27 アウトリーチ活動
- 28 新人自己紹介

共同利用・共同研究

- 30 共同利用研究ハイライト
- ヘムタンパク質におけるヘムの多機能性の起源の解明に向けた深層学習によるヘムタンパク質ポケット構造からの機能予測
鷹野 優 [広島市立大学大学院情報科学研究科 教授]
- 液体の統計力学理論による生体分子の機能解析 吉田 紀生 [名古屋大学大学院情報学研究科 教授]
- 層状物質の放射光角度分解光電子分光 (ARPES) 田中 慎一郎 [大阪大学産業科学研究所 准教授]
- 35 施設だより——新型プリント基板加工機の紹介
- 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 関連学協会等との連携——「日本表面真空学会」と分子研の連携の重要性

分子研技術推進部

- 38 技術職員紹介
- 40 訃報

大学院教育

- 42 コラム
- 43 受賞者の声
- 44 イベントレポート
- 44 修了学生及び学位論文名

- 45 各種一覧

「研究評価」と「論文出版」

福山 秀敏 東京理科大学



アカデミアにおける研究成果は論文として出版・公開され、研究評価は論文の内容に基づく。従って「評価」と「出版」は表裏一体である。努力して到達した新知見を認めてもらい褒められることほど研究者にとって嬉しいことはない。最近ある財団からの援助により新境地を拓いた研究者の『励まされて』という記事を読み、ひたすら「知りたい・理解したい」という気持ち（「curiosity-driven」）をもとに困難に立ち向かう「研究」の持つ魅力と同時にその内容の「評価」の重要性を再認識した。科学技術の展開が国の命運さえも左右しかねないことを反映して「研究振興」に多額の研究資金（多くの場合原資は税金）が用意される昨今では、「研究活動」振興とその成果の「評価」「出版」は国家的重要案件となっている。実際2023年5月に仙台で開催されたG7「科学技術」会議でもオープンアクセスが重要項目として取り上げられている。他方「評価」の実態は大変心もとない。例えば研究評価に関するサンフランシスコ宣言San Francisco Declaration on Research Assessment (DORA)が公表されたのは2015年であるが、我が国の対応は極めて鈍く、「周回遅れ」などと言われている。実際ある研究機関の最近の国際レビュー公開報告書には「Impact factor (IF) and

average citations are no longer international standard.」とまで指摘されている（“average citations”はtop 10%, 1%等）。IFは雑誌についての指標であって、個々の論文内容とは直接関係ない。文科省も「IFが誤用されている」と明言している。一方で、国のプロジェクトの「評価」に際して、「成果報告」書に「顕著な業績」と論文が掲載された雑誌のIF情報の記述を求める欄があり、驚いたことがある（IFを口にする評価者は、内容を理解できない、あるいは理解しようとし、のいずれかに分類できそうである）。IF等は直近の「論文注目度」であり、「流行」という短期の商業主義の観点では有用な指標であろうが、「本当の研究」の指標としては役に立たない。このような商業主義的雑誌に掲載された論文の引用文献にはその雑誌に掲載された文献が必要以上に引用され、論文で最も留意すべき「先行研究への敬意(respect to scientific originality)」の欠如がしばしばみられる。この傾向は、多額の研究予算をふんだんに使うことが出来る研究グループにしばしばみられるが、これは「研究資金に見合う研究成果」を「評判・うわさ」で担保しようとしている行為と考えれば納得できる。虚栄心を満足させるために（vanity-driven）いわゆる「一流誌に出版」し、また評

価に利用することは「研究力復活」への「国税」の使い方としては効果が少ないばかりか、逆に研究モラルの低下を進め（例えば、論文記述を歪め「痛々しいほどに」研究上司に忖度する等）、将来を担う人材の育成には役に立たない。多額の研究費の配分を任務とするfunding agencyには「評判」と同時に「国内の新しい芽」への細かい配慮を期待したい。

現状を直ちに多少なりとも克服するためには、まず「評価」する立場にある研究者が、それぞれの研究成果を理解し適切に対応する必要がある。場合によっては個人単独では内容の理解が適切にできないことはしばしば起こる。その際には、個人ではなく、複数の専門家同士の率直な意見交換が可能な「評価パネル」の利用が有効であろう。このような「謙虚な意見交換」の場は経験豊かな専門家にとっても大変貴重であることを痛感する機会がしばしばある。責任を持つ世代が次の世代を思い具体的な行動を取るべき状況にある。

ふくやま・ひでとし
 専門：物性物理学（理論）
 経歴：1970年理学博士（東京大学）、Harvard 大学、ベル研究所、東北大学理学部・金研、東京大学物性研究所・理学部、を経て2006年より東京理科大学。東京大学名誉教授、日本物理学会名誉会員。

君塚 信夫 九州大学大学院工学研究院応用化学部門 主幹教授

分子研ネットワークによる創発



きみづか のぶお

1982年 九州大学工学部合成化学科卒、1985年九州大学大学院工学研究科合成化学専攻博士課程 中退、1985年11月九州大学助手（工学部）、1990年マインツ大学博士研究員、1992年九州大学工学部助教授、2000年九州大学大学院工学研究院教授、2009年主幹教授、2020年 JST-CREST「自在配列と機能」研究統括、2021年 JST-SPRING 九州大学事業統括

研究生生活のスタート—國武研のこと

1981年春、私は九州大学工学部合成化学科、國武豊喜先生の研究室に配属された。合成二分子膜の発表(JACS 1977)から4年後であり、合成脂質の分子構造と二分子膜特性(会合形態、ゲル—液晶相転移、相分離・融合など)の相関に関する基礎がほぼ出来上がっていたように思う。國武研のスタッフは講師1名、助手2名、教務員1名で、合成実験室が3つあり、部屋毎に研究テーマが時系列で変化しながら進んでいた。研究室への学部生配属数は3~4名で、その殆どが修士課程を経て就職するため、配属時の学生総数は博士課程1名を含む11名であった。JSPS特別研究員制度が創設されたのは1985年であり、当時は博士研究員はおらず、年齢の近い2名の若手助手は自ら実験し、毎金曜日17時~の検討会では、学生と同じペースで進捗発表した。すなわち助手2名が学生実験などの職務をこなしつつ、切磋琢磨しながら博士研究員の役割を担っていた。分子研は、内部昇進を行わな

いことで有名であるが、國武研も(冗談で)「助教授3年、助手5年」と言われるくらい数年でスタッフは転出し、新スタッフが着任すると新テーマがスタートするという新陳代謝が機能していた。また國武研の特徴として、「卒論と修士論文研究では全く異なるテーマに取り組む」不文律があった。学部から修士課程の間に複数のスタッフと異なるテーマに取り組むことによって学生の視野が広まり、その経験は社会にでて必ず役に立つという考え方である。一方、独立法人化の結果、教授1・助教授(講師)1・助手2という講座体制は消失し、さらに近年、院生が就活に多くの時間を割き、研究活動に集中できる時間の減少が顕在化するようになってからは、B4→M1のテーマ変えを見直さざるを得なくなった。

分子研との出会い

当時助手であった下村先生は、アゾベンゼン二分子膜を研究されており、分子構造に応じた吸収スペクトルの変化がKashaの分子励起子理論により

説明できることに興味を持った。私は学部、修士課程で2,3のテーマを遍歴した後、博士課程では二分子膜中に蛍光性発色団を導入し、規則配列した発色団間の励起子相互作用と一重項励起子移動、アクセプター分子へのエネルギー移動について研究し始めた。当時、國武研の分光機器は、紫外—可視ならびに蛍光分光光度計のみであった。一方、分子研の山崎 巖教授、玉井尚登先生らは、シンクロナス励起モード同期色素レーザーおよび時間相関光子計数装置を用い、色素をドーピングした二分子膜ベシクルやLB膜などを対象に、ピコ秒から数十ナノ秒領域のレーザー蛍光分光を、時間分解蛍光スペクトルを駆使して展開されていた。國武先生の計らいにより、下村先生と共に山崎先生、玉井先生らと共同研究させていただいたのが、分子科学研究所との出会いである。部屋全体があたかも巨大な分光装置のような設備に驚いた。二分子膜における励起子移動(博士論文)と分子研における共同研究経験は、後に“分子組織化フォトン・アップコン

バージョン”の想起に繋がった。

分子研ヒューマンネットワークと繋がる

助教授になって、金属錯体の化学に視野を拡げた。多層二分子膜フィルムの親水部層間を鋳型として二次元シアノ架橋Cu(II)-Ni(CN)₄錯体を逐次合成し、ESRスペクトルの角度依存性から二次元錯体が二分子膜表面に平行に配向していることを報告した(ACIE, 1995)。この論文が分子研ネットワークと繋がるきっかけになった。北川宏先生(当時 北陸先端科学技術大学院大学)から第46回錯体化学討論会(近畿大学, 1996)の若手セッションに呼んでいただき、はじめて錯体化学会に参加した。そこで我が国を代表する多くの先生方が、分子研に在籍し、物理化学的な手法を活かして卓越した成果をあげ、全国の大学に転出されていることを知った。

その後、脂質で被覆したハロゲン架橋一次元金属錯体の研究をスタートし、伊藤翼先生が代表を務められた特定領域研究「集積型金属錯体」(1998-2001年度)、北川進先生の「配位空間の化学」(2004-2007年度)に公募採用していただいた。これらの特定領域研究を通して現分子研所長の渡辺芳人先生をはじめ、錯体化学分野の多くの先生方と知己を得た。擬一次元ハロゲン架橋金属錯体は、山下正廣先生らにより分子研で合成、理論ともに発展した分野であることを知り、私が溶液分散ナノ錯体の研究に進んだのは分子研のお陰ともいえる。錯体化学の専門家に混ざって発表することは緊張の連続であったが、居酒屋での懇親会

で田中晃二先生に激励していただいたことが励みになった。分子研ゆかりの先生方は、切磋琢磨しつつも、強い信頼関係で結ばれており、また異分野からの研究者を温かく取り込むヒューマンネットワークを形成していると感じた。

大学における研究環境の変化

1980年代、日本国全体の研究費の8割は民間企業が担い、日本企業の中央研究所は、イノベーション・エンジンだった。80年代後半に日本はバブル景気に入ったが、91年以降のバブル崩壊で、日本経済は長期の停滞に陥った。さらに90年代後半は、米国ベル研究所などに付随する形で、大企業中央研究所の時代の終焉と呼ばれる現象がおこった。米国はスモール・ビジネスを国家で支援する「SBIR制度」を導入して新たなイノベーション・モデルを生み出したが、日本は米国より17年遅れて日本版SBIR制度を導入したものの失敗した。¹⁾

一方、大学では、平成の3大改革「大学設置基準の大綱化(1991)」「大学院重点化(90年代)」「国立大学法人化(2004)」を経て、企業の経営管理モデルが取り入れられ、原風景としての大学は様変わりした。2000年代以降、「大学を起点とする日本経済活性化」が政策課題となり、産業競争力や経営力の観点から大学の機能が問われ、短期的に経済価値に還元可能な成果が求められるイノベーションの創出装置として再定義された。²⁾ 産業界から大学に「選択と集中」が持ち込まれ、成果が見え、資金獲得力の

強いところに投資する傾向が強まった。2017年には、指定国立大学法人制度が、また政府の10兆円ファンドの運用益から、1校当たり年数百億円の助成金が25年間にわたり投入される国際卓越研究大学制度がスタートした。

筆者が学術システム研究センター主任研究員を兼務していた時、副所長の勝木元也先生が「学術は“知”の限界に挑み、未踏の分野を拓く営みである。“知”は人類の宝であり、国力(科学技術力、経済力など)の源である。国力の個別の要素に知識と人材を贈る“湧き出る泉のような源”であり、水源が枯れば、その下流にある国力は完全に死滅する。学術の振興は、国家の最重要事項である。」と言われたのを鮮明に覚えている。学問の府である大学に大規模な助成を行うことと、トリクルダウン理論を適用して稼げる大学を支援することの意味は異なる。目に見えるイノベーションは土壌から木の芽がでて陽光のなかで成長するが、既存技術の延長であり、パラダイム持続型なのでロードマップを描ける。山口栄一先生はこれを知の具現化(開発: 演繹、昼の科学)と呼んでいる。¹⁾ 山口先生によると、既存のパラダイムを置き換えるイノベーションは、社会や市場からは見えない土壌の中でおこる知の創造(夜の科学)を契機とし、既存の知から離れた共鳴場で創発により創造された知から地上に芽吹いた新しい芽こそが既存のパラダイムを破壊するブレークスルーをもたらす。当然ながら、この創発プロセスは予めロードマップには描けない。ごく一部の大学だけを支援し、そのロードマップ評価

を行うことが、日本国の研究力向上とイノベーション創出につながるのでしょうか。

今の日本に必要なのは、「人」に対する投資である。幸い、若手研究者に対するJST創発的研究支援事業や、博士課程学生に対する支援「科学技術イノベーション創出に向けた大学フェロシップ創設事業」、「次世代研究者挑戦的研究プログラム」がスタートしている。大学には、博士課程学生のキャリアパス構築が求められているが、化学分野に関しては幸いにして博士課程学生の企業への就職は他分野に比較して好調といえる。³⁾ 一方、我が国は出生率低下による総人口の減少により、現在の1,257億人から現在の博士課程学生が65歳を超える2065年には8,808万人まで縮小すると推計されている。²⁾

2040年代以降の日本は、10人に4人近くを65歳以上の高齢者が占めることになり、長寿化する社会では、これまでの「学習→仕事」「仕事→老後」という二段階移行が、Lynda Grattonらが著書“Life Shift”で述べたようにマルチステージ化するであろう。⁴⁾ 人生のどのステージをどの順番で経験するかという選択肢が劇的に拡大するのである。今の博士課程学生には、来るべき百寿社会の様々な場面において活躍し続ける能力とスキルを磨き続ける必要性を説くことが必要であろう。

分子研への期待

分子研はまもなく創立半世紀を迎えるが、オンリーワンの研究がなされ続けることは、様々な学術分野からの求心力を生む。すなわち、分子研とその

ヒューマンネットワークに集う人間が“知の越境”をおこし共鳴する場になることが期待される。異なる分野の“知”と“知”が相互作用する土壌からは、「ちがう未来」に向かう創発がおき、新しいイノベーションに繋がるに違いない。我が国の科学技術・学術の進化を促す国家基盤として、分子研のますますの発展を祈念する。

1) 山口栄一、「イノベーションはなぜ途絶えたか—科学立国日本の危機」ちくま新書(2016)

2) 吉見俊哉、「大学は何処へ」岩波新書(2021)

3) 日本学術会議 化学委員会化学企画分科会、見解「日本の社会・産業をリードする化学系博士人材の育成支援と環境整備」(2023)

4) リンダ・グラットン、アンドリュー・スコット、池村千秋訳、「Life Shift—100年時代の人生戦略」東京経済新聞社(2016)

遷移金属イオンとガス分子の協奏による生理機能制御

青野 重利 自然科学研究機構 生命創成探究センター・分子科学研究所 教授

2002年に岡崎統合バイオサイエンスセンター（着任時は、統合バイオサイエンスセンター）・分子研に着任してから、あっという間に20年以上が経過してしまいました。2025年3月には定年を迎えることとなります。この間、恵まれた研究環境で研究を進めることができたことを感謝しております。



遷移金属イオンを含む金属タンパク質は、生物のエネルギー代謝、物質代謝、情報伝達など様々な生理機能制御に重要な役割を果たしている。我々の研究グループでは、金属タンパク質の中でも特に、気体分子をシグナル分子とするセンサータンパク質を研究対象とし、それらの構造機能相関の解明、およびセンサータンパク質生合成機構の解明を目的として研究を行なっている。

環境中に存在、あるいは生体中で合成される酸素、一酸化炭素、一酸化窒素等の気体分子は、生体中におけるシグナル分子として機能し、様々な生理

機能制御に関与している。生体において気体分子がシグナルとして機能するためには、それをセンシング（気体分子の存在を感知）するためのセンサータンパク質の存在が必須である。しかしながら、アミノ酸のみから構成される単純タンパク質は、気体分子と相互作用することは無いため、気体分子センサータンパク質は、気体分子と相互作用可能な遷移金属イオン、あるいは遷移金属含有補欠分子族をセンサーモジュールとして利用している。本稿では、センサータンパク質そのものではないが、水素センサーとして機能する

NiFe型ヒドロゲナーゼの活性中心を構築するための一連の生合成反応の中で、活性中心で利用されるCOの生合成反応を触媒するHypXタンパク質、および酸素をシグナル分子とする酸素センサータンパク質HemATについて、我々の研究成果を紹介する。

1. HypXタンパク質によるCO生合成反応

水素ガスの酸化反応・プロトンの還元反応を触媒する酵素であるヒドロゲナーゼは、バクテリアなどによる水素代謝において中心的な役割を果たしている他、最近では燃料電池用触媒としての利用も期待されている金属酵素である。活性中心の構造の違いにより、[NiFe]型、[FeFe]型、[Fe]型の3種のヒドロゲナーゼが存在するが、いずれの場合も活性中心のFeには、COが配位している（図1）。また、[NiFe]型ヒドロゲナーゼには、酵素ではなく水素ガスをシグナル分子として利用し、水素依存的な遺伝子発現制御機能を有するタイプのヒドロゲナーゼが存在することも報告されている。ヒドロゲナーゼの活性中心に含まれるCOは、酵素反応により生合成されることが分かっているが、CO生合成反応の分子機構は

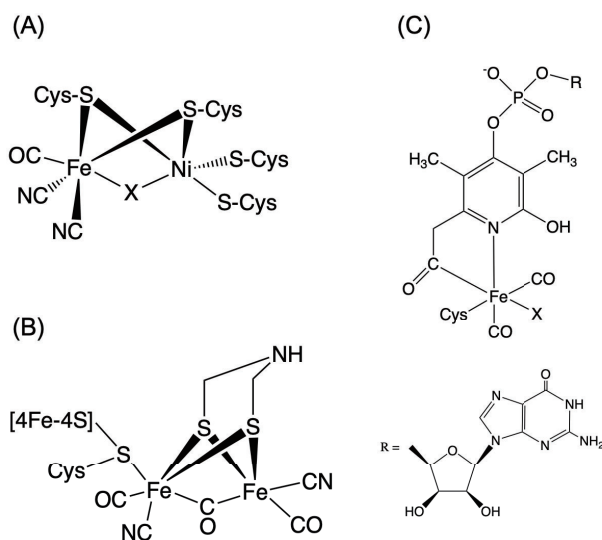


図1 (A) [NiFe]型ヒドロゲナーゼ、(B) [FeFe]型ヒドロゲナーゼ、(C) [Fe]型ヒドロゲナーゼ中に含まれる活性中心の構造。

不明な状況であった。我々は、[NiFe]型ヒドロゲナーゼが利用しているCOの生合成に関わる酵素 (HypX) の結晶構造を決定し、HypXがこれまでに全く例の無い反応によりCOを合成していることを明らかにした。

HypXは二つのドメイン (N末ドメインとC末ドメイン) から構成されており、分子内部にはこれら二つのドメインにまたがる形でキャビティーが存在している (図2)。また、C末ドメイン側のキャビティーには、補酵素A (Coenzyme A: CoA) が結合していることが分かった。HypXのN末ドメインは、N¹⁰-ホルミル-テトラヒドロ葉酸 (N¹⁰-formyl-THF) を基質とし、N¹⁰-formyl-THFからのホルミル基転移反応を触媒する酵素 (これらの酵素

は、N¹⁰-formyl-THFのホルミル基を、アシルキャリアタンパク質中に含まれるパンテインの末端-SHに転移する。図3に示すように、パンテインは、CoAにも含まれる構造である) と構造相同性を有している。また、ホルミル基転移反応の触媒残基として機能する三つのアミノ酸残基も、HypX中の対応する位置 (H74, D80, D109) に保存されている (図4B)。HypXにテトラヒドロ葉酸 (THF) をソーキングすると、これら触媒残基の近傍に存在する基質結合部位にTHFが結合することもわかった (図4A)。

これらの結果を基に、次に示すようなCO生合成反応機構を提唱した。HypXのN末ドメインとC末ドメインでは、それぞれ異なる二つの化学反応

が進行すると考えられる。N末ドメインでは、反応基質としてN末ドメイン中のキャビティーに結合したホルミルテトラヒドロ葉酸からCoAへのホルミル基転移反応が進行する。この時、キャビティー中のCoAは直鎖状に伸びたコンフォメーションを取り、CoAの末端にある-SH基はN末ドメインに結合したホルミルテトラヒドロ葉酸中のホルミル基の側に位置する必要がある。図2に示した構造では、CoAは折曲がったコンフォメーションをとっており、末端の-SH基はC末ドメイン中に位置している。したがって、上記で述べたようなホルミル基転移反応が進行するためにはCoAのコンフォメーションが変化し、末端の-SH基がN末ドメインに結合したホルミルテトラヒドロ葉酸

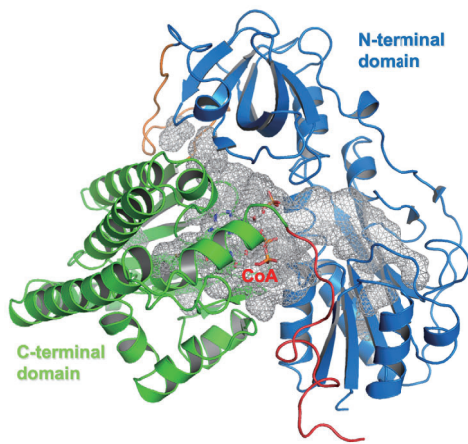


図2 HypXの結晶構造。N末ドメイン (青色) とC末ドメイン (緑色) の分子内部を連結する形でキャビティ (灰色のメッシュで表示した部分) が存在している。キャビティ中に補酵素A (Coenzyme A: スティックモデルで表示) が結合している。

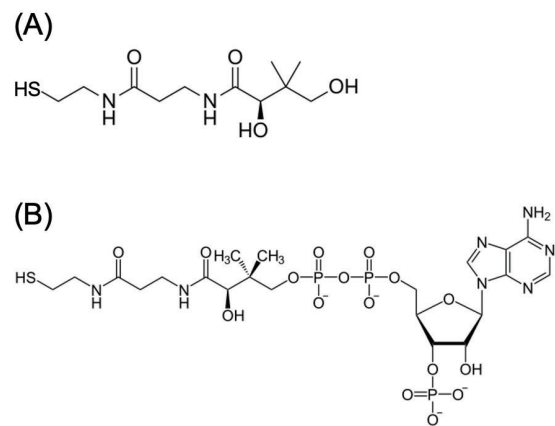


図3 (A) パンテイン、(B) 補酵素Aの構造。

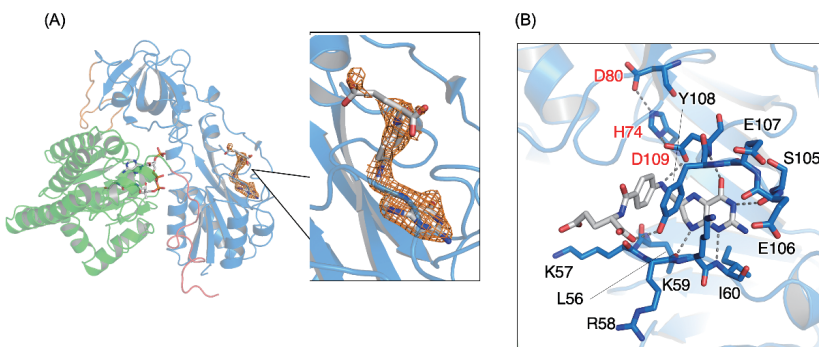


図4 (A) N末ドメインに THFを結合したHypXの構造。拡大図中に、THFの電子密度 (オレンジのメッシュ) と、そのスティックモデルを表示。(B) THF結合部分の拡大図。アミノ酸側鎖 (青色) とTHF (灰色) をスティックモデルで表示。ヒスチジン74 (H74)、アスパラギン酸80 (D80)、アスパラギン酸109 (D109) がcatalytic triadと呼ばれ、ホルミル基転移反応を触媒する触媒残基として機能する。

の近傍に位置する必要がある。変異型 HypX (A392F/I419F 変異体) の構造解析、および MD シミュレーション (ExCELLS・分子研の奥村久士准教授グループとの共同研究) により、このような CoA のコンフォメーション変化が可能であることを確認している。

HypX の N 末ドメインに結合した N¹⁰-formyl-THF から CoA へのホルミル基転移反応が進行すると、ホルミル-CoA が反応中間体として生成する。生成したホルミル-CoA は、CoA 分子の末端部分に存在するホルミル基が、HypX の C 末ドメイン中の酵素活性サイトに位置するよう (図 2 に示した折曲がったコンフォメーション)、キャビティー中で大きくそのコンフォメーションが変化すると考えられる。最終的に、C 末ドメイン中で、ホルミル-CoA からの CO 脱離反応が進行し、CO と CoA が生成する。ホルミル-CoA からの CO 生成反応は、これまでに全く報告例の無い、新規な反応である。

2. ヘムをセンサーモジュールとする酸素センサータンパク質 HemAT

HemAT は、細菌の酸素に対する走化性 (生育に適した酸素濃度環境に向けて移動する現象) 制御系において酸

素センサーとして機能しているタンパク質であり、センサードメインとシグナリングドメイン、二つのドメインから構成されている。HemAT 中のセンサードメインは、グロビン構造を有しており、分子中に含まれるヘムが酸素センサーの本体として機能している。酸素分子が HemAT 中のヘムに結合することにより、走化性シグナル伝達が開始されるが、HemAT センサードメイン内でどのようにして特異的に酸素を認識しているのか、酸素をセンシングした情報をどのようにしてシグナリングドメインに伝達しているのか等についてはよく分かっていない。そこで我々は、シグナル ON 状態である酸素結合型 HemAT、およびシグナル OFF 状態である還元型 HemAT の分子構造を明らかにし、両者の構造を比較することにより、HemAT による酸素センシング、および酸素センシング後のシグナル伝達機構解明を目指した。

酸素化型および還元型 HemAT センサードメインの X 線結晶構造解析を行い、酸素化型は 2.50 Å 分解能、還元型は 2.36 Å 分解能でそれぞれ構造を決定した。それぞれのヘム近傍構造を図 5 に示す。酸素化型 HemAT、還元型 HemAT いずれの場合も、His 119

が軸配位子としてヘムに配位している。酸素化型 HemAT の近位側ヘムポケットでは、軸配位子である His 119 の近傍に存在する Tyr 129 が、3 つの水分子を解して Glu 168 との間で水素結合ネットワークを形成している。一方、還元型 HemAT では、この水素結合ネットワークは形成されていない。酸素化型 HemAT では、この水素結合ネットワークが存在することによりセンサードメインの C 末端ヘリックスが固定化されているのに対して、水素結合ネットワークが存在しない還元型 HemAT では、C 末領域がフレキシブルになっているものと推定される。センサードメインの C 末端ヘリックスは、センサードメインとシグナリングドメインを連結するリンカーとして機能している。このことは、HemAT 中のヘムに酸素が結合する (酸素がセンシングされる) ことにより、リンカー部分のコンフォメーション変化が誘起されることを示唆しており、このコンフォメーション変化が HemAT による酸素特異的なシグナル伝達に重要な役割を果たしていると考えられる。現在、この仮説を検証するため、X 線結晶構造解析、およびクライオ電顕単粒子解析による全長型 HemAT の構造解析を進めている。

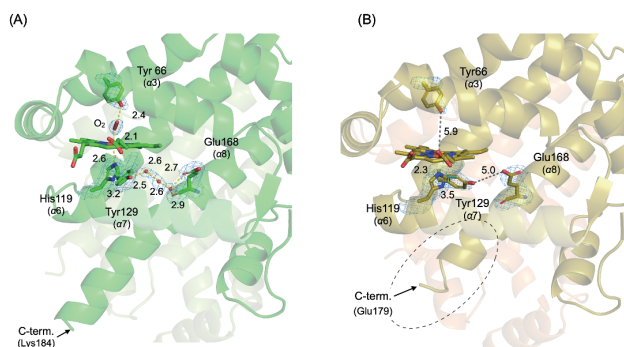


図 5 (A) 酸素化型 HemAT、(B) 還元型 HemAT のヘム近傍構造。酸素化型ではセンサードメインの C 末端ヘリックスは、184 残基目まで電子密度が観測されるのに対して、還元型では 180 残基目以降の電子密度はディスオーダーにより観測されない。

UVSOR40周年記念行事報告

表題の記念行事を12月1日―3日の3日間にわたり、岡崎コンファレンスセンターとオンラインのハイブリッドにて開催しました。

初日は渡辺所長のご挨拶、文部科学省基礎基盤研究課長西山氏の祝辞に始まり、記念講演会として6件のご講演をいただきました。その後の祝賀会では地元愛知12区よりご選出の衆議院議員青山周平様にもお越しいたごき、応援のメッセージをいただきました。歴代のスタッフやユーザーの皆様との温かな懇談であったという間の2時間でした。二日目からは、年1回開催している定例のユーザー成果報告会を記念行事に組み込み、UVSOR

シンポジウム2023を開催いたしました。あわせて第6回次期施設建設検討会として、我々の目指す生命科学と光科学の異分野融合の実現にむけて、特別企画講演「バイオ系における光科学の展開」を設けました。バイオ系の光計測分野を牽引されている7名の先生方にご講演をいただき、パネルディスカッションで目指すべき方向性について科学目標と組織論について議論を深めました。

UVSORの40年は1983年の11月10日にいわゆる初点を発振してからの、放射光施設の運転期間をカウントしたものです。今回、40周年記念冊子として、これまでの「40年の冒険、これからの

挑戦」を発行しました。さらに次期計画の具体的な内容について、コンセプトデザインレポートを合わせて発行いたしました。いずれもpdf版にてweb上で公開しております（QRコード）。今後のUVSORの挑戦を是非とも応援していただき、忌憚のないご意見をお聞かせいただければ幸いです。

最後に、1年間にわたる準備段階からお世話になった関係者の皆様にこの場をお借りし御礼申し上げます。

(解良 聡 記)



各レポートのリンク先



放射光60周年記念シンポジウム報告

日本の放射光利用研究は、60年前に田無市の東京大学原子核研究所の電子加速器に寄生する形で始まりました。その成果を踏まえて、東京大学物性研

究所が電子加速器を入射器として使った世界初の放射光専用小型施設SOR-Ringを建設し、1976年から利用がはじまりました。さらに1982-3年に

世界最高エネルギーの専用施設として、高エネルギー物理学研究所のフォトンファクトリー（PF）、化学分析研究を志向した分子科学研究所のUVSORが

それぞれ本格的な稼働をはじめました。現在では大型施設SPring-8を筆頭に各地の施設で活発に放射光利用研究が展開されています。さらには2023年末には最新の放射光施設NanoTerasuからのファーストライトが無事供されました。

このような日本における放射光60周年を祝し、国際シンポジウム“60 years of Synchrotron Radiation in Japan (JPSR60)”を、2023年10月24日(火)-25日(水)の2日間にわたり日本放射光学会主催・分子研共催という形で岡崎コンファレンスセンターを会場として開催しました。JPSR60の現地参加者数は106名でした。プログラム詳細はJPSR60のウェブページをご覧ください。またYouTube配信でも171名を超える方に視聴頂きました。YouTube配信された内容は現在も視聴できます。一日目および二日目の配信へのリンクはこちらです。

<https://jsrr.smoozy.atlas.jp/en/jpsr60>

<https://www.youtube.com/watch?v=1sW3Qg4M7fQ>

https://www.youtube.com/watch?v=gaZ_c6G5Wng

海外からの日本に縁のある放射光科学のレジェンドの方や国内の第一線で活躍されている方々をお呼びし、放射光分野の今後の展開についても皆様と共に議論を深めました。海外の諸先生には日本の研究者との交流の思い出や放射光利用での国際連携における日本のコミュニティの貢献について紹介いただきました。日本の放射光黎明期から最先端を引っ張ってこられた諸先生には歴史的にも貴重な写真や資料を交えてこれまでの放射光の歩みとこれからという視点で、エールをいただきました。二日目には、最新の放射光科学および次世代に向けての動向として、各分野の最前線の先生方に熱いご講演をいただきました。分子研・UVSORにかかわりの深い先生としては、Marie-Emmanuelle Couprie教授(SOLEIL)にはUVSORの技術職員の皆さんとの自由電子レーザー(FEL)の共同研究のお話をさせていただきました。Han Woong Yeom教授(POSTECH)には博士課程学生時代から利用したPF BL-18A, BL-7A, BL-7B、さらに

UVSORやHiSORでの研究のお話をいただき、韓国の放射光、特にARPES研究の最先端の話題を講演していただきました。菅先生(阪大)にはMax-Planck-InstituteやSOR-Ringでの実験から現在のUVSORでの協力研究までご紹介いただきました。

懇親会には多くの交流が見られました。特に、海外招待講演者の方々が参加者との情報交換、ポスターでの議論に熱心になり、終了時間を過ぎても交流が続いていた光景は、準備に携わったものとして、嬉しいことでした。

本行事でご講演を頂きました先生方、ご出展くださいました企業の皆様、日本放射光学会事務局の佐藤亜己奈様、中村千佳様、JPSR60プログラム委員会アドバイザーの小杉信博KEK物質構造科学研究所長、石川哲也理化学研究所放射光科学研究センター長、朝倉清高北海道大学触媒科学研究所教授、JPSR60プログラム委員の皆様方、会場準備等でご協力いただきましたUVSOR関係者の皆様に改めて御礼申し上げます。

(横山利彦・松井文彦・阿部仁* 記)

*KEK物構研/茨城大学 准教授



イオン液体インフォマティクスの発展にむけて

報告：光分子科学研究領域 解良 聡

表題の研究会を9月13日―14日に、岡崎コンファレンスセンターとオンラインのハイブリッドにて開催しました(参加者内訳：現地18名、オンライン19名の計37名)。研究会のタイトルは発起人である東京大学の北田敦先生にご提案いただきました。イオン液体は日本で大きく発展した研究分野で、世界を代表する多くの著名な研究者がおり、またその薫陶を受けた次世代の若手研究者たちが頭角を現しつつあります。「イオン液体」の登場から約30年が経過し、十分な構造物性データが蓄積されてきていますが、そのデータを活用してエネルギー、医療、環境といった地球規模の課題解決をもくろんだ未知機能の探索といった、マテリアルズインフォマティクスの視座に立つイオン液体研究は世界的にも黎明期にあると言えます。

マテリアルズインフォマティクスは、実験科学、理論科学、計算科学、データ科学にまたがる最前線の融合学理であり、またそうであるがゆえに個々の研究者の研究活動で多くの壁を打破することは困難と言えます。特に、一般論として若手研究者は研究ネットワー

ク形成が不十分であり、人的交流による分野の相互理解が欠かせません。そこで各分野の気鋭の研究者がイオン液体やポリマー、無機材料、液晶、濃厚電解液等の多種多様な材料の表現手法について、現状と展望について解説を行いました。各研究者のノウハウともよべる要素技術について現状の知見を持ち寄り、長所短所の相補によってイオン液体の機能物性予測とその実証に関する有効的なアプローチを議論しました。

初日は機械学習を中心に3件の講演がありました。東京工業大学の畠山敏先生は、構造-物性データベースをもとにした、分子構造から物性を予測するプログラムの構築や、生成系AIであるGPT-4を活用した研究を紹介されました(タイムリーに11月10日の日経新聞の記事でご覧になった方もいらっしゃるかもしれません)。また、京都大学の世古敦人先生は、機械学習がむしろ馴染み深いものである無機材料において、量子力学に基づく第一原理計算の多重実行にかかるコスト削減のための機械学習やアルゴリズム論的手法の導入事例を紹介されました。統計数

理研究所の吉田亮先生は、統計的機械学習による準結晶発見の実例とともに、限られたデータの壁を乗り越えるための統計的機械学習の方法論である転移学習や、ポリマー研究における構造物性データ収集のためのコミュニティの取り組みについてご紹介いただきました。二日目は理論計算に関する2件の講演で、北里大の石井良樹先生は、凝縮系の相互作用を考慮した分子モデリングの手法として密度汎関数理論(DFT)計算と分子動力学(MD)計算を自己無撞着に繰り返すことで多体効果を取り込んだ有効的な原子電荷分布を決定する手法とイオン液晶への展開事例を紹介されました。岡山大学の篠田渉先生は、リチウムイオン電池用材料として注目されている濃厚電解液中のLiイオン伝導機構に関して、配位子交換挙動や分極モデル開発などを紹介されました。

対象材料をイオン液体に限定しなかったことにより、異分野での成果や抽出課題をイオン液体研究者が「学習」したと言えます。今後イノベーションの源流を見出す端緒となることを期待したいと思います。



UVSOR-SPring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング

報告：極端紫外光研究施設 田中 清尚

2023年9月29日、表題のUVSORとSPring-8の赤外分光分野ではじめての合同研究会を開催いたしました。この二つの放射光施設は、国内のほとんどの放射光赤外ユーザーをカバーしていることから、放射光赤外ユーザーの声を集約した貴重な研究会となりました。研究会は現地（分子研研究棟201号室）とオンラインのハイブリッドで開催され、15件の講演があり、参加者は合計60名を超えました。本研究会では物理、化学分野に加えて、薬学、医学、法科学、地球生命や産業（民間企業）といった幅広い分野の講演者にご参集いただき、それぞれの分野の最前線の研究について紹介していただきました。ユーザー同士の交流を推進すると共に、最先端の研究状況や装置開発について情報を交換するよい機会となりました。また参加者内訳では、10社を超える民間企業からの参加があり、民間利用の観点でも放射光赤外分光への期待を感じました。

講演では、赤外磁気光学スペクトルの解析法の開発や、圧力などの外場環境下での測定など、物理、化学分野の先端分光研究の紹介があった一方、それ以外の分野、特に薬学、医学などの分野で

は空間分布測定や微量不純物の測定など、顕微機能を利用した研究が多く見られました。現在、UVSORとSPring-8では数

マイクロメートルの空間分解能を利用した実験が行われていますが、より高空間分解能での測定や高効率（短時間）での測定を望む声が、特に民間利用のユーザーから寄せられました。本研究会ではneaspex/attocube社の製品紹介の講演と現地での企業展示があり、ナノスケールのプローブ顕微鏡装置の紹介をしていただきました。次期放射光施設を検討するUVSORとしても、ナノ顕微機能の整備が今後の放射光赤外分光の目指すべき方向性の一つと感じました。

またSPring-8では高輝度化を目指してSPring-8 IIへのアップグレードを計画しており、SPring-8 IIでは電子ビームパイプが細くなることで赤外光を取り出す大きな開口部が確保できなくなることが予想され、赤外ビームライン



が消滅する可能性が高い状況となっています。講演会の後には、UVSORの見学会を実施し、これまでUVSORを利用していなかったSPring-8のユーザーにビームラインを紹介するとともに、SPring-8からの装置の移設やユーザーのスムーズなUVSORへの誘導を含めて、今後のSPring-8とUVSORの協力体制についてもSPring-8の担当者と議論を開始いたしました。これからUVSORの赤外ビームラインは大きく変化すると思われます。これまでできなかった新しい測定にも挑戦しますので、ご意見やご要望をお伝えいただければと思います。引き続き皆様の変わらぬご協力をお願いいたします。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。

分子研研究会「溶液の化学現象の軟X線分光測定の前線」

報告：光分子科学研究領域 長坂 将成

近年の放射光の高輝度化と、液体ジェットや軟X線透過膜などの技術革新により、軟X線分光法による触媒反応、電気化学反応、光化学反応、生化学反応などの溶液中の化学現象のオペ

ランド計測が世界中で盛んに行われるようになってきました。軟X線分光法は、軽元素（C, N, O, Fなど）や遷移金属（Ti, Mn, Fe, Coなど）の元素選択的な電子状態解析が行えますが、軟

X線が大気や水に強く吸収されるため、液体試料への適用が困難でした。分子研UVSOR-IIIの軟X線ビームラインBL3Uでは、透過法による液体の軟X線分光法を開発することで、これまで

多くの共同研究者の方々と共に、軟X線分光法の化学利用を推進してきました。一方、国内における軟X線領域の第三世代放射光施設は、現在建設中のNanoTerasuしかなく、外国と比較して、高輝度でコヒーレンス性も増す軟X線を用いた新たな研究の展開は遅れていました。

そこで、分子研UVSOR-IIIとスウェーデンの第三世代放射光施設「MAX IV」による国際ワークショップを分子研研究会として、岡崎コンファレンスセンターで10月2日～4日の3日間の日程で開催しました。研究会のポスター(図1)にありますように、主題は「軟X線分光法による溶液の化学現象の解明」でして、長坂と徳島高博士(MAX IV)との国際共同研究に関する議論から発案されました。溶液の軟X線分光法に関する日本とスウェーデンの国際共同研究を推進するための意見交換を主な目的としました。

MAX IVからは、3名の研究者が現地参加して、4件の招待講演(2件はオンライン講演)を行いました。液体ジェットの軟X線分光測定と共に、軟X線小角散乱、共鳴非弾性X線散乱、大気圧近傍光電子分光法などの第三世代放射光施設

の特長を活かした研究成果を発表して頂きました。国内からは、溶液の軟X線分光法を中心に、様々な実験と理論を用いた研究成果の報告を頂きました。また、NanoTerasuで計画中の共鳴非弾性X線散乱測定、高エネルギー加速器研究機構Photon Factoryでの時間分解測定、X線自由電子レーザーSACLAを用いた軟X線分光測定、UVSOR-IIIの軟X線ビームラインBL4Uにおける走査型X線透過顕微鏡、Shenzhen(中国)で計画中の放射光施設などの施設報告をして頂きました。研究会では、25件の招待講演と共に、16件のポスター発表がありました。ポスター発表からはホットピックとして、口頭発表に4件を選出しまして、円偏光を利用したキラル分子の測定など、軟X線分光法の新たな利用の可能性を示して頂きました。集合写真(図2)にありますように、参加者は60名程度となり、とても盛況な研究会になったと思います。また、エクスカーションとして、MAX IVの研究者の方々と、大樹寺と岡崎城を観光しました。大樹寺の三門から岡崎城が展望できる「ピスタライン」を観て頂き、岡崎の歴史的な魅力についても伝えられたと思います。

本研究会は、UVSOR施設長の解良

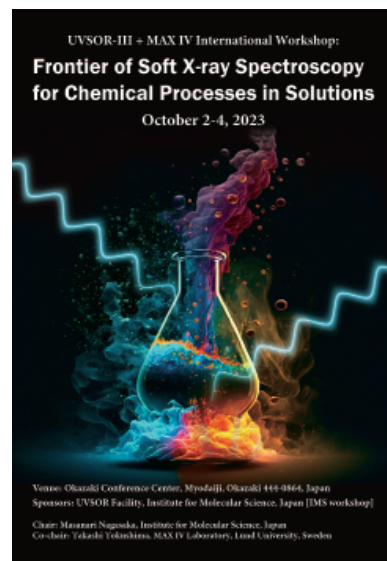


図1 研究会のポスター。広報室に作成して頂きました。

聡先生に所内対応者になって頂くと共に、片柳英樹博士を中心に多くの分子研スタッフの方々にご協力して頂きました。皆様のご協力に感謝申し上げます。研究会ではスウェーデン大使館の方から、日本とスウェーデンの間の国際共同研究に関するファンドについてのご説明も頂きました。本研究会をきっかけとして、軟X線分光法に関する多くの国際共同研究が推進されることを期待しています。



図2 2日目の午後に撮影した集合写真。

原子と分子科学研究所との研究交流会について

報告：協奏分子システム研究センター 秋山 修志

分子科学分野における国際的なハブ機能を強化する活動として、中央研究院 (Academia Sinica) 原子と分子科学研究所 (IAMS) との協力関係が挙げられます。その歴史は古く、2005年より計6回の協定更新を経て、今日まで世代を超えて受け継がれています。このたび、IMS-IAMS Joint Meeting を分子科学研究所で対面実施 (2023年9月11日) する運びとなり、前回 (2019年9月21日) から約4年ぶりにIAMSの同僚と再会することができました。

今回は計6名の演者が登壇し、IAMSとIMSの若手研究者が交互に講演する形式となりました (下記プログラム参照)。熱のこもった発表や質疑応答が続き、休憩時間を短縮しても予定時間を大幅に超過するほどの盛況ぶりでした。そのなかでも、倉持准教授の発表はDr.

Jim Lin (IAMS現副所長) の興味を引いたようで、同氏が開発を進めている先端的超高速レーザー分光について複数の質問が寄せられました。

午前のセッションの終了後、MOUに関わる今後の活動方針について意見交換しました。連携を深化させつつも、負担増に伴って活動の継続が困難にならないよう相互に工夫する方向性を確認しました。英語を使用言語とするセッションを分子科学討論会に申請し、その場で討論するのはどうかという提案がありました。コミュニティへの共有や同討論会の国際化への貢献という観点からも、一考に値する提案だと思われます。

意見交換が一段落したところで、午後から計算科学研究センター (岡崎准教授による企画・引率) とUVSOR (平准教授による企画・引率) の見学に出

かけました。午前のセッションでやり取りし切れなかった内容や、実機を目前にした説明に熱が入ったのだと思いますが、見学会についても予定時間を超過することになってしまいました。学術的な議論はもちろん大切ですが、それ以上に重要なことは、このような機会に積極的に参加して同世代の友人を作ることだと思います。そのような機会を提供する場として、今後も活動を継続できればと考えています。

最後に、本研究交流会の主催にあたり、分子科学研究所の研究力強化戦略室の皆さまにお力添え頂きました。なかでも国際担当の永園さんには、IAMS側の来所者の受け入れから研究会当日の準備まできめ細やかなフォローをして下さり大変助かりました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

IMS-IAMS Joint Meeting 日時：2023年09月11日 (月) 場所：分子科学研究所 研究棟3階301号室

- 08:55 – 09:00 Welcome Remarks
- 09:00 – 09:30 Dr. Jim Lin (IAMS) The Reactions of Criegee Intermediates with Hydrogen-bonding Molecules
- 09:30 – 10:00 Hikaru Kuramochi (IMS)
Dissecting hierarchical correlations in light-energy conversion systems with advanced ultrafast and single-molecule spectroscopy
- 10:00 – 10:30 Dr. Kaito Takahashi (IAMS)
What can we still learn about aqueous hydroxide vibration spectra from small hydroxide water clusters?
- 10:30 – 10:40 Break
- 10:40 – 11:10 Yoshitaka Taira (IMS)
Generation of ultra-short pulsed gamma rays in UVSOR-III and their application to material analysis
- 11:10 – 11:40 Dr. Jer-Lai Kuo (IAMS)
Molecular interactions, structures and vibrational spectra: human or artificial intelligence
- 11:40 – 12:10 Kei-ichi Okazaki (IMS)
Molecular simulation of functional motions in biomolecular machines
- 12:10 – 13:00 Lunch & Business Meeting on MOU related matters
- 13:00 – 13:30 Tour of Research Center for Computational Science
- 13:30 – 14:00 Tour of UVSOR
- 14:00 – Closing



16th Eurasia Conference on Chemical Sciences参加報告

報告：生命・錯体分子科学研究領域 飯野 亮太

2023年12月13-15日に開催された16th Eurasia Conference on Chemical Sciences (<https://www.eurasia2023.com/home>)に参加しましたので報告いたします。本会議は1988年からアジア地域の各国で開催されている歴史ある国際会議で、分子研の研究顧問である北川進先生(京都大学特別教授)が永年国際組織委員(Permanent International Organizing Committee Member)を務められています。

第16回の今回は、タイのチュラロンコン大学化学科 (<https://web.chemcu.org/>)が中心となりバンコクで開催されました。チュラロンコン大学はタイを代表する大学の一つであり、理学部と分子研の間で基本合意書(Memorandum of Understanding)を交わしてインターンシッププログラム等で長年提携しております。この縁もあり、分子研から横山利彦教授、江原正博教授、奥村久士准教授、中村彰彦クロスアポイントメント准教授、伊藤暁助教、小杉貴洋助教、原島崇徳助教、飯野の8名が招待講演を行いました。奥村グループからは総研大生の大多和克紀さんも参加し、ポスター発表を行いました(写真)。

本会議では、以下の7つのテーマのセッションが設定され、発表と議論が行われました。1. Green Process for Fine Chemical Production/Biomass Conversion、2. Renewable Energy and Carbon Capture/Conversion(横山教授が発表)、3. Natural Product, Chemical Biology and Medicinal Chemistry、4. Materials Chemistry for Sustainable Future(中村准教授が発表)、5. Environmental Monitoring

and Remediation、6. Molecular Design and Modelling(江原教授、奥村准教授、伊藤助教、小杉助教が発表)、7. Chemical and Bio-Sensors(原島助教、飯野が発表)。私が講演させて頂いたChemical and Bio-Sensorsのセッションでは、感染・疾病の臨床現場即時検査(point of care testing)のための低コスト簡易デバイスの開発や、痛風の原因となる血中尿酸結晶の検査を行うスマートフォン偏光顕微鏡の開発等、応用を志向した発表が多い点が印象に残りました。セッション名からもわかるように、会議全体としても応用を見据えた発表が多いと感じられました。

本会議で最も感銘を受けた点は、2日目に行われたチュラロンコン大学化学科の学部生によるポスターセッションです。どのポスターもレベルが高く、学生と参加者の間だけでなく、学生同士で活発な議論が行われていました。さらに、発表者の半数以上が女性である点が非常に印象的でした。日本

では昨今、理系における女性比率の向上が課題となっており、分子研においても女性教員の比率の改善が喫緊の課題となっています。タイの化学系ではこの点はすでに達成されており、日本よりもずっと進んでいます。実際、チュラロンコン大学化学科は教員72名のうち31名が女性であり(<https://web.chemcu.org/faculty-member/>)、学科長のVoravee Hoven教授は女性です(本会議の組織委員長でもあります)。

本稿がいつ出版されるか把握していませんが、最後に一点、宣伝をさせていただきます。2024年3月6日に、Hoven教授を含むチュラロンコン大学化学科の教員8名が分子研に来訪され、合同研究会を開催する予定です(https://www.ims.ac.jp/research/seminar/2024/03/06_6141.html)。分子研の皆様におかれましては、積極的なご参加・交流を是非、よろしくお願いいたします。



写真. Welcome Receptionでの分子研参加者の皆様。左から、伊藤助教、横山教授、江原教授、小杉助教、大多和さん、原島助教(飯野撮影)。

小林稜平日本学術振興会特別研究員に日本生物物理学会若手奨励賞

この度、「ミトコンドリア型ATP合成酵素の阻害因子IF₁が示す回転方向依存的な制御機構：1分子操作実験と分子動力学シミュレーション」という研究題目で日本生物物理学会の若手奨励賞をいただきました。この賞は生物物理分野で活躍しようとする若手会員に対して将来への期待を表彰するもので、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を通じて、特に優れた発表を行った5人以内の研究者に授与されます。

修士学生するとき、私をはじめて学術会議に参加したのは生物物理学会で、拝聴した最初のプログラムが若手奨励賞の口頭発表でした。若手の研究者が自身の研究について情熱を持って話す姿は私にとって憧れの存在になり、いつかは自らもこの舞台上で講演してみたいと思うようになりました。また、昨年度の生物物理学会では分子研から米田さん、古池さんが同時受賞し、私も続いて受賞できればと考えていました。今回の研究発表は前職と現職で行っ

た異なる分野の研究を融合させたものです。長年にわたり生化学実験を中心に行ってきた私が、計算の分野に移行した際は今後の研究がうまく進むか不安でした。実際、最初の1年は計算科学研究に慣れることに精一杯で、観察したい現象が計算機上で再現されずもどかしい日々でした。その度に、岡崎先生にはディスカッションにお付き合いいただき、研究の方向性や計算科学研究のポイントなどを話し合ってきました。試行錯誤の末、少しずつ成果を上げることができ、学会での発表に至るまでの道のりとなりました。とはいえ、今回は計算分野の内容で発表する最初の学会で、発表方法の要点が分からず準備に時間を要しました。本番前には岡崎グループの皆様発表の練習にご協力いただき、表現の確認や予想される質問に備えることができました。

今回の学会では、発表後に多くの方々から直接質問や感想をいただきました。これほどの反応を得られるとは思っ

ておらず、研究や発表の準備をしてきて良かったと感じる経験となりました。最後に本研究を共に進めてきた岡崎圭一准教授、前職の東京大学の野地博行教授、上野博史講師に感謝いたします。今後も良い成果が残せるように精進していきます。

(小林 稜平 記)



授賞式直後に飯野亮太教授に撮っていただいた1枚

分子科学研究所50周年のご案内

分子科学研究所は、広く研究者の共同利用に供する事を目的に、1975年4月に設立され、2025年に創立50年の節目を迎えます。これまで様々な物性や機能を有する分子の構造や機能の発現機構、電子状態などの解明を目指す国内外の研究を施設利用や共同研究で支えると共に、自らも実験と理論の両面から分子科学を先導する研究を推進してきました。

この、創立50周年という大きな節目を記念するためのさまざまな記念事業を実施し、創立50周年記念事業では、日頃ご支援をいただいている皆さまをお招きしての記念式典のほか、座談会などの各種記念事業を予定しています。皆さまに、より身近に分子科学研究所を感じていただくとともに、さらなる研究活動の活性化を目指しています。ぜひ多くの皆さまのご指導・ご鞭撻のほどお願いいたします。



分子研50周年記念特設サイト
<https://www.ims.ac.jp/50th/>



分子研で始めたこと



上野 隆史

(東京工業大学 教授)

うえの・たかふみ / 1998年大阪大学 大学院博士後期課程修了、博士(理学)、三菱化学株式会社、分子科学研究所、名古屋大学物質科学国際研究センター、京都大学WPI物質—細胞統合システム拠点を経て2012年より現職。

〔専門〕生物無機化学、タンパク質工学

〔研究室HP〕<https://www.ueno.bio.titech.ac.jp/>

私のアカデミックキャリアは、2000年3月に渡辺芳人教授(現 分子科学研究所 所長)の研究室に助手として着任してからスタートしました。企業から転職し、いよいよ自由に研究ができる環境にやってきた!!と浮かれていた私は、当時、渡辺研の助手であった小江誠司先生(現 九州大学教授)が猛烈な勢いで研究を展開しているのを目の当たりにし、度肝を抜かれました。私が着任してから2年余りで渡辺研が分子研から名古屋大学へ引越すのとほぼ同時に大阪大学へ異動されたので一緒に研究できた期間は非常に短いものでしたが、その間に、研究に対する真摯な姿勢とともに、当時の分子研では最大規模だった忘年会や(50-60人だったと思います)、岡崎城での花見の準備を通しての交渉術など、研究以外のこともたくさん教えていただきました。

一方、渡辺先生の名古屋大学への異動は、最初の一年間が分子研とのクロスアポイントだったために、名古屋大学から分子研に常駐する学生が来ることになりました。その一人であった越山友美さん(現 立命館大学准教授)と総研大生の大橋雅卓君(現 豊田中央研究所)と共にヘムタンパク質への金属錯体触媒の導入に成功しました。これで、私の着任時に渡辺先生と約束した「ヘムを使わない新しい人工金属酵素の合成法」を確立す

ることができました。大橋君と二人で進めていた時はタンパク質と金属錯体の複合化には成功していたのですが、収率も悪く触媒活性の評価と分子設計に苦戦していました。そこに越山さんが加わることで一気に触媒反応の最適化を実現できました。

次の目標は、その人工金属酵素の構造を決定することでした。我々の方法は、ミオグロビンからヘムを除去したアポミオグロビンのヘム結合サイトを使って様々な金属錯体を固定化する方法です。ミオグロビンの変異体と金属錯体の最適な組み合わせを評価するためにESI-TOF MSによるスクリーニングをおこなっていました。さらに、ヘムとの競争実験から目的の結合サイトに金属錯体が固定化されている間接的な証拠は得られていました。しかし、分子設計には必ず高分解構造が必要になるだろうということで、人工金属酵素の結晶化検討をスタートしました。同時に、構造生物学的にはミオグロビンはすでに知られた構造であり、タンパク質結晶構造解析の素人である我々にノウハウを提供してくれる共同研究先を探すのには大変苦労していました。そのような状況で、渡辺研が名古屋大学に移った後に、越山さんがほぼ独学で見事に結晶化に成功しました。我々からすると、まさに努力の先に迎っていた貴重な“結晶”です。幸運にも

名古屋大学工学部の山根隆先生に興味を持っていただき、その構造を決定することができました。自分たちが合成した複合体の電子密度を初めて見た時の喜びと、感動と、興奮は今でも昨日のこのように思い出されます。一度、精密な構造が明らかになると、結合部位のアミノ酸置換と組み合わせで様々な金属錯体を固定化することができるようになりました。最終的には、タンパク質ケージであるフェリチンの中に有機金属錯体を複合化した有機金属酵素に到達し、その内部でフェニルアセチレンの重合や、カルボニル錯体を内包したフェリチンを細胞内に送り込んでシグナル伝達を制御するなどの細胞制御にも使えるようになりました。

このように、錯体化学と生物無機化学を基盤とする研究では、タンパク質の高分解能構造は分子機能の理解と設計に不可欠です。一方、結晶化から構造決定に至るには膨大な時間と高度な技術が必要とされるものの、一度構造が決定できてしまうと、そのノウハウは不要となります。構造がなくても機能化はできるのに、機能を説明するのに構造は不可欠であり、その構造決定に多くの時間を費やして機能を十分に最適化できないというジレンマを抱えるようになりました。その頃、結晶化技術としてタンパク質結晶がMOFのような格子構造を有するため、架橋反応によって安定化して分解能を向

上させる手法があることを知り、この手法をそのまま人工金属酵素結晶の材料化に使えないかと考えました。最初は、大量のタンパク質結晶を合成するのに苦労しましたが、今では細胞内で自発的に結晶化するタンパク質を基盤とした大量合成にも成功しています。固体状態でタンパク質を機能化する発想は、従来とは全く異なる視点からの材料合成技術となり、迅速構造決定から持続可能材料までその可能性は膨らんでいます。

分子研で過ごした2年間は、学生実

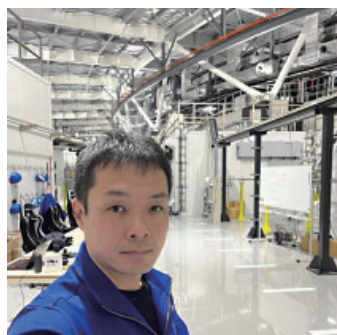
験などの雑務もなく、良い意味で外から隔離され、クレイジーな妄想をたくさんできた時間でした。さらに、ボスの渡辺先生と共に名古屋大学へ異動することによって、その妄想を具現化する機会にも恵まれました。分子研で始めた人工金属酵素の研究が現在のタンパク質結晶エンジニアリングの研究につながるとは当時は全く考えていませんでしたが、分子研では「オリジナルな研究をする」ことと、「一つの場所には長居しない」ということを刷り込ま

れ、当時の私は何の疑いを持つことなくそれらを実行したいと思い、現在の研究に至ることができました。

今まで、自分の好きな研究を進めることができたのは、分子研はじめ、私がお世話になった様々な場所で支えてくれた諸先輩や仲間達、研究室のメンバー、そして一緒についてきてくれた家族のおかげです。この場を借りて感謝したいと思います。



新しい研究施設 (NanoTerasu) を立ち上げる



山根 宏之

(光科学イノベーションセンター／東北大学大学院工学研究科 部長／特任教授)

やまね・ひろゆき／学位取得(博士(理学)、千葉大学)後、学振特別研究員を経て、2008年4月より分子研助教(小杉Gr)、2017年9月より理研(播磨)研究員、2021年6月より現職。専門は放射光で分子性固体・界面を観ることを軸としている。この1年は研究者としてより建設現場の監督としての時間が長い。一緒に仕事を進めてくれる人を探しています。興味のある方はご連絡ください。(yamane (アットマーク) phosic.or.jp)

2022年10月に分子研レターズに近況を書いて欲しいという依頼をいただきました。せっかくの機会なので、今の仕事が形になってから記事を書かせていただきたいと思います、「次々回のレターズまで待つて頂けないでしょうか」とお願いしたところ、ご快諾いただきました。本拙文のタイトルにあるように、私は現在「NanoTerasu (Terraceではない)」と名付けられた3GeV高輝度放射光施設の立ち上げに携わっています。2023年12月7日に現在の仕事の一つの形として世にお披露目できましたので、現在に至るまでの私の今をご紹介しますと思います。

プロフィール欄に書いたように、私の専門は「放射光で分子性固体・界面を観ること」を軸としているつもりです。分

子研時代は固体表面に有機半導体を整列させて電気特性に関連した電子状態をUVSORの放射光を用いて研究していました。絶対にやりたいと思っていた研究が一通り実施でき、次に何をしようか思案していたところ、新しい研究テーマとして接着の研究をSPring-8でやりますか?というお誘いをいただき、理研(SPring-8)に籍を移しました。接着は誰もが利用したことのある現象の一つだと思います。しかし、くつつくのは分かるが詳細な理由は分からない。そのため、接着剤の開発は熟練者の経験と勘で進められているという世界で、学術的に未開拓の分野です。産業界でも接着技術の重要性が高まっており、接着メカニズムの解明に迫るSPring-8での研究は企業との産学連携の枠組みで進めてきました。

紙面の都合で詳細は省略しますがSPring-8での研究も順調に進み、接着界面(接着剤と複合材マトリックスの界面)の化学結合とその分布の可視化に成功して喜んでいたところ^[1]、「次世代放射光施設(当時の呼称)で人を探している。山根さんを推薦したいと思うが考えてみないか。」というお話をいただきました。次世代放射光施設は、官民地域パートナーシップという枠組みで国の基幹施設に民間もコミットするという、おそらく世界でも初めての試みで、東北大学の青葉山新キャンパスで建設が進められています。官の方は量子科学技術研究開発機構が主体で、加速器と3本のビームラインを建設しています。こちらは誰が何をするかわかっていて、今さら手出しは出来ない

なという印象でした。今回ご縁があったのは民・地域の代表機関である現所属です。こちらは基本建屋と7本のビームラインを建設しており、ビームラインとインターロックの整備を中心に力を発揮してほしいとのことでした。

放射光を生業としてきた身からすると、新しい放射光施設の立ち上げは人生で一度あるかないかの機会です。自分の中では仙台に行くことを決めていましたが、仙台に移るにあたり一番悩んだのは家族のことです。長女が受験を控えていましたし、妻も仕事で重要な局面にあったので、単身赴任を基本として妻と相談しました。茨城出身の妻は仙台にとっても惹かれるものの、子供や仕事のこともあり、「お金を稼ぐ大学生の息子が急にできたと思うようにする。行きたいんでしょ？行って来たなら？」と仙台行きに理解を示してくれました。子供とも相談し、とりあえず単身赴任でということでは決まりました。顔を合わせた会話のオンラインで可能な時代なので、何とか日常的なコミュニケーションがとれています。とは言え、子供関連の行事（面談、部活送迎、etc）で妻の負担が増えたという心苦しい点はあります。仙台ー姫路間の移動では、仙台空港と神戸空港の間でSkymarkが運行していて、半年に一度のチケット発売日に予約すれば片

道6000円程度で移動が可能で、お財布にもやさしく往復できています。

2021年6月に現所属に着任し、建設現場を見に行きました。建屋はまだ完成しておらず、様々な重機が行き交っている状態でした（写真a）。このような状態でしたので、放射光ビームラインを構成する各機器や放射線遮蔽ハッチの打ち合わせに参加し、輸送チャンネル光学系と放射線安全・機器保護インターロックについて主体的に準備を進めてきました。輸送チャンネルとインターロックの現地整備が本格化したのは2023年春からです。7本のビームラインを一気に整備する大作業です。ここでは書き切れない様々な問題はあったものの、現時点で真空チャンバーの据付・アライメントはほぼ終了し、その中に組み込むミラー、分光結晶、回折格子のインストールもゴールが見えてきました。その節目として、実験ホールに放射光を初めて導く「ファーストビーム」というイベントを2023年12月7日に催し、多くのメディアに報じていただくことができました（写真b）。ただし、「俺たちの本当の戦いはこれからだ。」です。2024年度の運用開始に向けて、ファーストビームを観測した地点から20～30 m先まで放射光を導くための光学系調整や分析装置の調整を進める必要があります。

それをビームライン7本分です。

ビームライン整備と並行して、将来的なユーザー確保のため、様々な業種の企業の研究所の方々との面談の機会もいただいています。様々な企業と議論をする中で、現象は把握していても、そこに至るメカニズムが不明なケースが多く、基礎的な研究が製品の信頼性や高性能化に直結していることを実感しています。NanoTerasuでの軟X線の新しい活用方法も開発しながら、社会課題の解決に貢献していきたいと考えています。

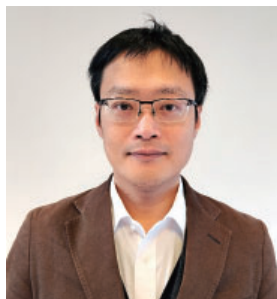
SPring-8での研究では、私の分子研ポジション（小杉Gr助教）の前任の初井宇記さん（理研）と一緒に進めました。研究での議論はもちろん、企業との付き合い方について多くのご指導をいただきました。今の仕事を進めるうえで重要な経験でした。NanoTerasuの立ち上げには多くの方々のご協力をいただいています。特に、分子研の大先輩の大橋治彦さん（高輝度光科学研究センター）のご指導・ご協力なしにはビームライン設計を進めることができませんでした。今後、分子研出身の山根がいてくれて助かった！と言っていただけよう精進していきたいと思います。NanoTerasuでお待ちしています。

[1] https://www.riken.jp/press/2022/20221012_2/





分子研と人の繋がり、広がり



嘉治 寿彦

(東京農工大学大学院工学研究院先端物理工学部門 准教授)

かじ・としひこ / 2007年3月 東京大学大学院理学系研究科 化学専攻 博士課程 修了、同年4月 東北大学金属材料研究所 産学官連携研究員、2008年9月 自然科学研究機構分子科学研究所 助教、2014年12月より現職(現職当初はテニュアトラック、2019年12月テニュア取得)

「分子研出身者の今」というコーナーですが、思い出話も書いて良さそうですので、私も思い出話多めで書かせていただきます。この原稿をご依頼いただいた頃、ちょうど分子研レターズ88号が手元に届き、これまでお世話になった様々な方々の近況を懐かしく読ませていただいたところでした。私が分子研で助教をさせていただいた研究室のPIである平本昌宏先生と、私の次に平本研の助教をされていた伊澤誠一郎先生の「分子研を去るにあたり」が掲載されており、その頃所長をされていた中村宏樹元所長の瑞宝中綴章のご受章の記事もありました。ページをめくっていくと、「新人自己紹介」に鈴木光一さんを見つけて驚いたり、さらにめくっていくと、「共同利用ハイライト」には佐々木岳彦先生。佐々木先生の研究室は、私が博士課程の学生で所属した齊木幸一朗先生の研究室と隣同士で、毎週一緒にミーティングしていました。他にも懐かしいお顔やお名前をたくさん、この号やそれまでの号でお見掛けしました。

私は分子研には、2008年9月から6年3ヵ月の間お世話になりました。思い返すとその間、平本先生をはじめ、分子研の方々、今は他所で活躍されているの方々、本当に多くの方々にお世話になりました。改めて深く御礼申し上げます。分子研を去る際には、決定か

ら1か月と少しで異動したため多くの方にご挨拶できなかったのが当時は心残りでしたが、その後の共同利用の際や他所でお会いできた方も多く、人の繋がり、分子研からの人の広がりというものを改めて感じた次第です。2023年3月の平本先生退職記念の会にも発起人の一人として加わらせていただき、多くの方々とお祝いをできたことは幸いでした。

岡崎では公私ともに様々なことがありました。分子研に赴任したのは大雨の直後で、本当に引っ越せるのか東北大の人達から心配されたのを覚えています。大雨以外は、分子研には大学の同期の長坂将成先生がいて、学部生の時に学生実験でお世話になった横山利彦先生もいらっしやることから不安は少なかったように思います。私は最初は宿舎で一人暮らしでしたが、その分研究時間はふんだんにあり、また、山手のハッピーアワーやUVSORの飲み会、様々な交流会に誘っていただき、研究所内外で多くの方々とお会いしたのを懐かしく思います。当時はかなり色々顔を出させていただいたため、研究よりも飲み会で顔を覚えていただいた方が多いかもしれません。

そのうち私も結婚し2人の子宝に恵まれ、同年代の方々も結婚したり、子供ができていたりして、飲み会への参加は減っていきましかつたけれども、今度はま

た別の、家庭という共通の話題もできました。宿舎でも妻子ともに、飯野亮太先生をはじめ分子研や生理研、基生研などの様々な先生方とご家族に、大変お世話になりました。時間が経つのは早く、分子研を離れて9年になり、あの頃産まれた2人に加えて、離れてから産まれた3人目もう小学生です。こうして振り返ると、分子研で過ごしたよりも、離れた後の期間の方が長いことに我ながら驚きますが、新婚からはじめての子育てという、私と家族にとって大切な一時期を過ごしたのも、分子研であり、岡崎でした。

研究においては当時やはり、学部生時代から将来研究しようと心に決めていた有機薄膜太陽電池の研究を、そのパイオニアである平本先生のもとでできたこと、また、総研大のご支援により、もう一人のパイオニアであるC. W. Tang先生のもとへ派遣いただいたことは、どちらも他に代えることのできない大切な経験です。有機薄膜太陽電池の研究も、その研究の中で始めた共蒸発分子誘起結晶化法という、真空蒸着中に液体分子も同時に蒸発させることで有機薄膜の結晶化を促進する薄膜成長法の研究も、異動後の東京農工大学の私の研究室でも現在まで続けております。

分子研での研究開始当初は、異なる有機半導体の混合膜の真空蒸着時に、

とにかく液体も混ぜてみよう、という段階で、膜の厚さも400 nm程度まででしたが、2020年までには厚さ10 μ mの混合膜内部の微結晶まで精密制御して成長できるようになりました。先日は分子研所属当時に出願させていただいたこの方法の特許も自然科学研究機構からお譲りいただき、感謝の念に堪えません。今後も研究に活用させていただきます。

私の東京農工大学での所属は、研究部門としては先端物理工学部門になります。一方、教育組織としては、異動直後は物理システム工学科の所属だったのですが、2019年に学部の再編があり、化学物理工学科という新学科の所属となりました。2023年からは大学院も化学物理工学専攻が立ちあがりました。化学工学と物理工学の両方が

学べるオンリーワンの学科で、基礎科学と工学の違いはあるものの、化学と物理の両方という意味で分子研や総研大とシンパシーを感じます。

この5年の再編の間は、旧学科と新学科の講義や学生実験の担当が多数重なったり、学科を閉じる業務と開く業務が並行したり、コロナ禍のオンライン講義対応もあったりと、様々な新しいことを経験した一方で、自分で実験する時間がなくなるだけでなく、学生と研究の相談をできる時間さえもなくなった時期もあり、分子研で日夜実験をしていた当時に平本先生に「毎日実験できていいなあ」と言われていたのはこういうことか、と噛みしめることも多々ありました。最近、コロナ禍の対応も終わったとともに、新学科の学生もM1になり改組も終わりが見えて

きて、この数年間の自分を省みつつも、気合を入れ直して研究と教育に向き合っていこうと決意しているところです。

幸い、研究室には毎年、元気な学生さんたちが来てくれています。どんどん過ぎる時に置いていかれぬよう、自らを省みる毎日ですが、学生さんたちが自分を踏み越えて大きく巣立っていきけるような、それでいてより大きな研究成果を得られるような研究室を改めて目指していきます。その中で分子研の方々や、分子研で出会った方々とまた、関わらせていただくことができましたら本当に嬉しいです。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。



装置開発室の皆さんありがとうございます



宇理須 恒雄

(株式会社NANORUS 代表取締役)

うりす・つねお / 2011年3月に分子科学研究所を定年退職し、名古屋大学にて2011年—2015年特任教授2015年—2020年客員教授として研究に従事。2020年2月、研究成果の実用化を目指してベンチャー企業(株)NANORUSをスタート。2007年より今年まで、日本ナノメディシン交流協会の会長として年一回のナノメディシン国際シンポジウムを、各大学の開催委員長を補佐して開催。2023年度で会長を退任予定。

名古屋大学時代のグループメンバー。真ん中が筆者。

私は2011年3月に分子科学研究所を定年退職し、翌年から名古屋大学にて特任教授として研究を続けさせていただいたのですが、2020年2月にベンチャー企業(株)NANORUSを起業し、現在まで研究開発を続けています。そもそもは2006年か2007年に、当時生理学研究所の教授であった池中一祐先生と新幹線で出会い、脳の神経ネッ

トワークがイオンチャンネルという膜蛋白質をながれる電流信号で制御されているということをお聞きし、興味をもったことに始まります。当時私自身はSiの表面科学を研究しており、この出会いをきっかけに、Siの電子回路と神経細胞のネットワークを融合し、イオンチャンネル(タンパクシットランジスター)で信号をやり取りする回路

を提案しました。当時の総研大の共同研究に提案し、採択していただいたことが、今日に至る研究の始まりです。現在、ピペットパッチクランプ並みの信号品質で神経細胞から多点でイオンチャンネル電流を計測できる“培養型プレーナーパッチクランプ”という装置を開発しており、2023-2024年度での製品化をめざしていますが、そ

の構成は、Si基板の微細加工、マイクロ流路の製作、小型電子回路の開発と、まさにものづくり技術の集約で、研究のスタートから今日まで、分子研装置開発室には大変お世話になっています。培養型プレーナーパッチクランプ装置の1号機は、図1に示す1チャンネルの装置で、当時装置開発室におられた鈴木光一氏が、土曜日の夜中の12時頃まで一緒にワイワイ言いながらつくってくださったものです。これが予想外にイオンチャンネル（TRPV1）電流信号を受けてしまい、その後の16年という長い研究開発につながるようになったのです。私はイオンチャンネルや細胞に関しては全くの素人でしたが、親切にこのイオンチャンネルを発現したHEK293細胞を提供くださり、その取扱いをご指導くださった生理研の富永真琴教授には心より感謝しています。また、私の研究室まで来て細胞の取り扱いをご指導くださった柴崎貢志助教（現在長崎県立大学教授）の御親切も忘れられません。富永教授には現在もご指導を仰いでおります。

現在実用化をめざしている“培養型プレーナーパッチクランプ装置”（図2）は、世界初オンリーワンの装置で、ピペットパッチクランプ（1991年ノーベル医学生理学賞、Erwin NeherとBert Sakmannによる発明）に負けな

い性能を目指して、Si基板の微細加工技術、マイクロ流路形成技術、機械加工技術、電子回路技術、等の高度な技術を必要とします。その意味で、分子研装置開発の各種技術は、きわめて重要な貢献をしてくださっています。一部は業者さんに加工をお願いできますが、ほとんどが自分で手作りし、試行錯誤する必要があります。機械加工、マスクレス露光技術、電子ビーム露光技術、マスクライナー、スパッタ装置、クリーンルーム、電子回路技術と装置開発室のすべての技術を利用していただいております。自分で操作できない装置は技術職員の方々に製作をお願いしていますが、皆さん親切に引き受けて下さりありがたく思っています。そんなに頻繁ではありませんが、機器センターの装置である、走査電子顕微鏡、各種分光装置、レーザー装置も、加工結果の評価や成分分析など、技術職員の方の指導のもとに利用させていただいております。これらの利用はナノプラットフォーム、今年度からはARIMという制度の下で、企業にも有償で公開されており、私たちが行っているような、非常に高度でしかも世界に無い技術を必要とする技術開発に対しては、きわめてありがたい制度であります。

開発装置の実用化を目指して2020年2

月に、ベンチャー企業（株）NANORUSをスタートしましたが、この企業名はNanometer particles following virusの頭と尻尾の言葉をつないだものに由来し、ウイルスに続く未知の病原体（原因）を探す目的で、細胞核内反応の分子科学の研究を目指すことを意図しております。

なお、私の、実験装置を手作りするという習慣は、大学院での研究で培われたように感じます。修士課程1年では、マイクロ波分光による分子構造解析を行ったのですが、その時、当時助教授の廣田榮治先生（元分子研教授、総研大学長）が秋葉原に私を連れてゆき小型のクライストロンを購入してくださったのが、実験装置手作りの始まりです。また、ARIMに関しては、名古屋大学や名古屋工業大学の各種装置も利用させていただいており、親切にお世話くださっている教員や技術職員の方々にも感謝しています。また、本原稿を執筆中に、装置開発室の水谷伸雄氏が突然逝去され驚いています。水谷氏には分子研在職時から今日まで、各種の機械加工で大変お世話になりました。あの人懐っこい笑顔が忘れられません。お悔やみ申し上げます。

科学技術立国の日本を支える重要な組織の一つとして、装置開発室がますます発展されることを期待しております。

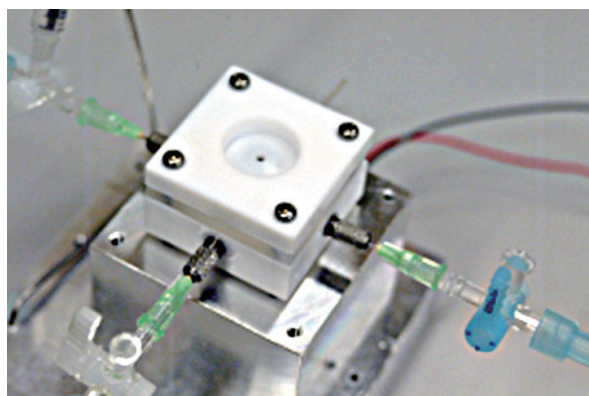


図1 2008年ころ製作した、培養型プレーナーパッチクランプ装置。



図2 1年以内での実用化をめざしている、4チャンネル培養型プレーナーパッチクランプ装置。



小林速男名誉教授に令和5年秋の瑞宝中綬章

小林速男名誉教授が令和5年秋の瑞宝中綬章を受章されました。

先生は、1965年に東京大学理学部化学科を卒業され、1970年に東京大学大学院博士課程修了、理学博士を取得されました。1971年には東邦大学理学部講師に就任され、1980年に東邦大学理学部教授になられています。1995年7月に分子科学研究所に分子集団研究系・分子集団動力学研究部門教授として着任されました。その後、分子集団研究系研究主幹などを歴任されています。また、総合研究大学院大学の教授としても教育・研究に多大な貢献をされました。1997年には日本化学会学術賞、2006年には日本化学会賞を授賞されています。

先生は、有機伝導体の設計と合成の研究分野において、新しい概念に基づく

物質設計指針を提案し、新奇で多様な物質性を示す数々の物質群を開発して世界を先導してこられました。次元性を定量的に評価するための分子性伝導体設計の方法として、量子化学計算手法の一つである強結合近似のバンド計算の方法をこの分野へ導入し、数多くの有機超伝導体を開発されました。また、金属錯体を用いた新規な分子性伝導体の開発を行い、分子性伝導体の概念を拡張したのも特筆すべき事です。さらに、磁性イオンを含む有機伝導体の開発研究は顕著なものであります。物理学の常識を覆す磁性と超伝導が共存する磁性有機超伝導体の開発と物性開拓を行い、化学と物理にまたがる大きな分野そのものを発展させ国際共同研究を牽引してこられました。そして、化学者の長年の夢であった単一分子の分子

性超伝導体の開発など、次々と新しい概念と指針を持った先駆的な物質設計を行い、関連周辺分野の学術発展に重要な貢献をされています。先生の物質設計や物性開発は全世界の研究者に波及し、世界をリードする著名な研究者と認められています。

小林先生はとても人を大切にする方で、門下生や当時の研究スタッフの活躍や健康をいつも気にされています。そんな先生だったからこそ、数々の業績や貢献、今回の受章に繋がったのだと思います。本当に嬉しく思っています。くれぐれもお身体をお願ください。瑞宝中綬章の受章、まことにおめでとうございます。

(中村 敏和 記)

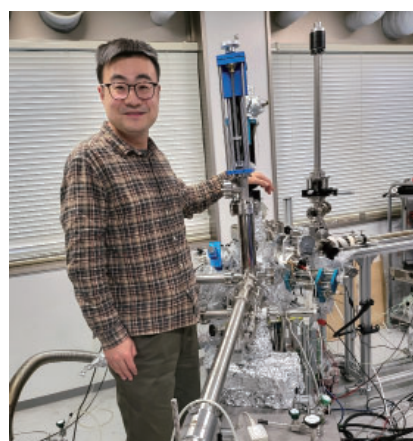


郭磊名古屋大学助教に日本物理学会若手奨励賞

2023年3月に日本物理学会若手奨励賞を受賞いたしました。私の博士課程時代から2020年まで取り組んできた電子源フォトカソードの基礎研究が本受賞の対象となっています。マルチアルカリフォトカソードの一種、CsK₂Sbの基板依存性を系統的に調査し、基板表面処理、基板結晶面方位、基板ドーブが量子効率に大きく寄与することを実験、理論の両面から明らかにし、世界トップレベルの10%以上の量子効率を達成する技術を確認しました。さらに、二次元材料グラフェンを既存基板にコーティングし、化学的、熱的に安定なCsK₂Sbフォトカソードを同じ基板上に繰り返し成膜できるこ

とを示しました。これによりカソードの成膜基板が再利用できない問題を解決し、実用性のある画期的な成膜技術となりました。また、GaAs系半導体における負電子親和性表面活性化についても研究を行い、通常使用される酸素ガスとは異なるガスを用いて活性化メカニズムをモデル化し、表面活性化現象の理解を深めました。

今回の受賞は、学生時代の指導教官や所属先の同僚をはじめとする共同研究者等のご支援のおかげです。例えば、グラフェンコーティング後の基板表面の清浄度を明らかにするために実施した、UVSORのBL6Uビームラインにおける光電子分光法による残留成分の



郭 磊 (かく・らい)

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

定量評価実験においてビームラインスタッフの協力なくしては有意なデータの取得はできなかったと思います。この場をお借りして、松井先生をはじめとする関係者の皆様、ならびに分子研時代の生活を支えて下さった全ての皆様に感謝申し上げます。今後もUVSORでの貴重な経験を活かして加速器における材料工学の研究に幅広く取り組み

たいと思います。

私は異動先の名古屋大学において次世代の研究者を育てるとともに、実用化に向けてフォトカソードの研究開発を続けています。特に、フォトカソードの電子構造と物理的な劣化メカニズムの解明を目指した放射光利用研究を進めています。その初期の成果を2023年9月に仙台で開催された日本

物理学会第78回年次大会において当グループの学生が発表し、学生優秀発表賞を受賞しました。このような研究にご興味のある方が居られましたら、遠慮なくご連絡いただければと思います。UVSORとの新しい連携を楽しみにしております。

(郭 磊 記)



分子研を去るにあたり

小林 玄器 理化学研究所 主任研究員
(前 協奏分子システム研究センター 特任准教授→
物質分子科学研究領域 准教授)

研究者としてのターニングポイント

こばやし・げんき / 2010年東京工業大学 博士(理学)取得。同年、同大学博士研究員、2011年神奈川大学 特別助手、2013年分子科学研究所協奏分子システム研究センター 特任准教授(若手独立フェロー)、2018年同研究所物質分子科学研究領域 准教授を経て2022年より理化学研究所開拓研究本部 小林固体化学研究室 主任研究員(現職)。2012-2016年 JSTさきがけ研究者、2018-2022年 総合研究大学院大学 准教授、2022-2023年 分子科学研究所 教授、2023年~早稲田大学先進理工学部 客員教授を兼務。



実は、ごく最近まで「分子研を去るにあたり」の原稿を書く気持ちになれず、先送りにし続けていました。これまでの研究活動の大半を占める分子研での約9年間の日々は、私にとってあまりにも大きな存在であり、何をどう書くべきか優先順位をつけられなくなっていたからです。2022年6月に理化学研究所に異動して1年半が経ち、ようやく、たとえ拙い言葉であっても自分の感謝の気持ちを伝えなければいけないという思いが勝り、原稿を書くに至りました。

若手研究者にとって、学位取得後の

5~7年程度の期間をどう過ごすかが後の研究者人生を左右すると言っても過言ではないと思います。日本では多くの場合、助教や研究員の立場で研究を推進することになりますが、スタッフとして研究成果を積み上げる(多くの論文を発表する)ことと自身の研究のオリジナリティーを確立することのジレンマに陥る方も多いのではないかと思います(もちろん、中には全てをハイレベルにこなせる超人もいますが)。私の場合、幸いにして比較的早い段階で現在の主要テーマであるヒド

リドイオン導電体の研究に出会い、やりたいことは明確になっていましたが、研究者としては圧倒的に実力不足でした。ヒドリドイオン導電現象を実証するための知恵、共同研究のための人脈、研究設備を整えるための予算獲得能力の全てが不足していました。特に、研究費に関しては日本の制度下で若手研究者が獲得できる予算には限界があり、やりたい研究を進められない状況に憤りを感じていた時期もありました。実績の無かった私にPIとして独立する機会を与えて下さり、潤沢なスタートアップ資金のサポートもしてくれた分子研には感謝しかありません。私の研究者

人生の転機であり、分子研に着任していなければアカデミアとしてのキャリアを諦めていたかもしれません。当時、若手独立フェローはポスドクを雇用することができなかったもので、一人での研究室立ち上げには苦労があったことも事実ですが、同時にその状況を心底楽しんでいました。論文に関しても、独立当時は責任著者として実験結果と考察全てに責任を持つことに不安がありました。早い段階でそれを経験できたことは非常に有意義でした。日本のアカデミアは、講座制の助教を経験

することがキャリアとして一般的です。それ自体は、研究者の着実な成長と知識・技術の継承という点で極めて重要ですが、環境によっては若手研究者の独自性の開花を妨げてしまうこともあると思います。多様なキャリアパスを提供するために、分子研が今後も若手研究者が独自の研究課題に挑戦する場であり続けることを願っております。

最後に、PIになる機会をくださった大塚所長、研究者としての成長を促してくださった川合所長、理研に快く送り出してくださった渡辺所長、メンター

の横山先生を始め適度な距離感で常にサポートして下さった教授の皆様、同僚として切磋琢磨してきた准教授の皆様、分子研の全ての関係者の皆様にこの場をお借りして深く感謝申し上げます。そして、小林グループのスタッフと学生の皆様、苦楽を共にしながら黎明期の研究活動を支えていただきありがとうございます。皆と立ち上げた研究を発展させられるよう、今後も精進いたします。引き続きよろしくお願いたします。

草本 哲郎

大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 未来物質領域 教授
(前 生命・錯体分子科学研究領域 准教授)

分子研の思い出と岡崎での日々

くさもと・てつろう / 2010年東京大学大学院理学系研究科にて博士(理学)の学位取得。同年理化学研究所 特別研究員、2011年同研究所 基礎科学特別研究員。2012年東京大学大学院理学系研究科 特任助教、2013年同研究科 助教。2019年分子科学研究科 生命・錯体分子科学研究領域 准教授。2023年4月より現職。週末は野球にのめりこんでる息子達とのキャッチボールやバッティング練習で汗を流しています。



私は4年と9か月(うち6か月は兼任として)の間、分子研にお世話になりました。この間、実に充実した日々を過ごすことができました。本稿では分子研でお世話になった皆さんへの感謝、分子研の良さや岡崎での生活で感じたことを伝えようと筆を手にとったのですが、いざ文章にまとめようとすると、様々な思い出や想いが錯綜しなかな筆が進まず……。うまくまとめきれないので、とりとめもなく書き下していこうと思います。

私が分子研に来たのは2019年1月でした。年初に川合眞紀所長から「頑張れよ!」と激励の言葉を頂いた後、さっそく研究室スペースの設計に取り掛かりました。着任が年度末近くだったこともあり、限られた時間の中で研究室スペースを一から設計するのは骨が折れましたが、

研究室を自分好みに作り上げられることに喜びを感じていました。中でも真っ新たな実験台とドラフトが導入された合成室が完成した時は、思わず感動の声が漏れてしまいました。現所属でラボを運営するにあたり、改めて、分子研の風通しの良さ、機動性の高さ、温かいサポートと自由度の高さを実感しています。

研究面では、2020年以降のコロナ禍も関係して、新しいテーマに腰を据えて取り組むことができました。必然的に研究室には私自身これまで使ったことない装置が並ぶこととなり、予期せぬ事態(振動問題等)等いろいろありましたが、やりたい研究に集中することができました。研究を進めるにあたり分子研機器センターに大変お世話になりました。機器センターでは専門のスタッフにより多種多様な装置がいつでも使えるよう適切に

維持・管理されており、素晴らしいです。具体的な実験内容にも相談に乗って頂きました。今後も外部ユーザーとして引き続きお世話になりたいと思っています。

分子研では家族との時間を大切にすることもできました。職場(山手キャンパス)のすぐ目の前にある小学校から、元気なかけ声や音楽が聞こえてくるたびに、運動場を駆け回る息子たちの姿を想像していました。分子研のキャンパス内にはたくさんの生き物がいます。私の二人の息子達は、岡崎に来た当初(当時息子達は5歳と2歳でした)、分子研のことを「バツ天国」と呼んでいました。夏の終わりには「トンボ天国」になりました。ある夏の夕方、息子達と山手キャンパス内を散策していた時に、コクワガタが木の幹を走っているのを見つけました。実はそ

の木は樹液が溢れでていて昆虫が集まる「魔法の木」でした。夏になると息子達や研究室メンバーと夜な夜なその木を観察しに行き、幾多のカブトムシやクワガタと戯れることができました。岡崎に来る前に住んでいた地域では、子供が遊べる公園はいくつもあったのですが、どこも整備が行き届いていた一方で、昆虫等の生き物に出会うことが滅多に無く、個人的に寂しさを

感じていました。岡崎では昆虫は勿論の事、川にいけばザリガニ、めだか、亀、はたまたライギョまで……、童心にかえて子供達と一緒に遊んだ時間が愛おしいです。私の場合は、分子研に来て、以前よりもはるかに長く濃密な時間を家族と過ごせたことが、研究をより一層楽しめたことに繋がっているように感じています。

最後にお世話になった分子研の皆様

に厚くお礼申し上げます。助教の松岡さん、秘書の川口さん、増田さん、青木さん、佐々木さんを始め、生命・錯体分子科学研究領域の先生方、機器センターの皆様、技術推進部の皆様など、多くの方に支えて頂きながら研究室生活を進めることができました。分子研とは今後も引き続き関わっていただけるとよいなと思っておりますので、これからもどうぞよろしく願いいたします。

松岡 亮太

大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 未来物質領域 助教
(前 生命・錯体分子科学研究領域 助教)

分子研最高！

まつおか・りょうた／三重県四日市市出身。2017年3月東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士後期課程修了、博士（理学）取得。筑波大学助教（2017.4～2019.12）を経て分子科学研究所助教（2019.12～2023.7）、2023年8月より現職。



2019年12月から2023年7月までの間、生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 草本グループの助教としてお世話になりました。現在は2023年4月に大阪大学に教授としてご栄転された草本先生の研究室で引き続き助教として研究を続けさせていただいております。短い期間ではありましたが、集中して研究に打ち込めたこと、そしてたくさんの素晴らしい人と出会えたことで、分子研では非常に幸福な時間を過ごすことができました。

分子研は研究環境が本当に素晴らしかったです。実験室では流し台に「純水が出る蛇口」が、ドラフトチャンバーに「いつでも吸引る過ができる吸気バルブ」が付いていたり、研究効率を高めるための設備が随所に設置されていました。共用の大型測定装置は機器センターが管理してくださっていて、保守に時間を割くことなく、いつでもベストコンディションで測定を行うことができました。

た。下っ端の助教に降りてくるはずの雑用はほとんどないと言ってもいいほど少なく、勤務時間のほとんどを研究活動に費やすことができました。

分子研で働く人たちが素晴らしい人ばかりでした。教授・准教授・助教の先生方はみなそれぞれの分野で活躍されている一流の研究者で、そんな先生方とも気軽にディスカッションができる垣根の低さが分子研全体の空気としてあるように感じました。おかげで、研究の幅を大きく広げることができると同時に、自分も質の高い研究をしなければならぬ、という緊張感を常に保つことができました。オープンスペース推進の流れで2021年秋頃に瀬川グループと居室が共同になってからは、2グループで集まって論文抄録会をしたり、夜に他の階からも人を集めて酒を飲みながら研究の話をしたりと、他グループとの関わりもさらに増え、充実した時間を過ごせました。技術員さん

や技術支援員さん、秘書さんや戦略室の方々もいい方ばかりで、誰とでも気軽に打ち解けた話げことができました。

お世話になった分子研の皆様は心から御礼申し上げます。とくに草本先生には分子研採用時から現在進行形で多大な配慮をいただいております。感謝してもしきれません。その他にも木村君、中貝さんなど草本グループOBOGの皆様、秘書の増田さん、川口さん、部屋が一緒だった瀬川グループの皆さん、共同研究でお世話になっている南谷先生、倉持先生、助教仲間の大塚さん、奥村さん、杉山さん、米田さん、測定でお世話になった機器センターの藤原さん、上田さん、浅田さん、賣市さん、宮島さん、長尾さん、伊木さん、藤川さん、久保田さん、そして上記の環境を作り上げてくださった川合前所長、渡辺所長はじめ運営の先生方に、深く感謝申し上げます。

分子研最高でした！



岡崎市と分子科学研究所での研究及び生活

南 多娟 Dayeon NAM (特任研究員)

生命・錯体分子科学研究領域

2020年8月に生命創成探求創成センター・分子科学研究所に特任研究員として着任し、岡崎市で4年目の研究生活を歩んでいます。韓国から札幌に行き北海道大学を卒業し、岡崎市に移りました。愛知は良く知らない地域であり、学生時代にも出張などでも訪れたことがない場所でした。岡崎市は都心から離れていますが、乙川と東岡崎駅周辺が美しく、札幌より冬は雪が少なく、過ごしやすい環境だと感じています。夏は暑いと感じつつも、四季折々の美しい風景と共に、岡崎市での生活を楽しんでいます。豊田市にはトヨタ自動車の本社があり、周りに自動車関連企業が多くあるのとトヨタカレンダーがあるのも私にとっては新鮮でした。また、愛知の食べ物にも興味を持ちながら生活しています。

研究室は山手地区にある生命・錯体分子科学研究領域、青野研究室に所属しています。バクテリアの金属代謝機能及び構造解明に焦点を当て、*in vitro*の分光学を用いて研究を進めています。バクテリアの研究に携わりながら、分光学の技術を活かすことで、幅広い知識やスキルを身につけています。分子研は



研究所なので大学とは違う雰囲気もありますが、研究室の雰囲気や先生方のサポートも頼もしく、研究者としての成長が期待できる環境に感謝しています。着任した時期がコロナ流行の最中であったため、研究所内での交流があまりなかったのが寂しく思いました。印象記に載せるため、写真を見返しても、マスクを着用した写真が多く、写真を選ぶのが難しかったです。徐々に交流の機会も増えているので、これからはさらなる交流を深めていきたいと思います。今後は、岡崎や研究所での生活をより一層充実させるために、積極的に交流し、研究成果を広く発信していくことが私の目標です。これからも熱心に研究に取り組み、成果を上げることで、自分も成長しながら分子研にも貢献できることを期待しています。

Okazaki: our second home for the last five years !

Vineet Bharti (Specially Appointed Researcher)

Photo-molecular Science

I joined the group of Prof. Kenji Ohmori in October 2018. Here, my research is mainly centered on the ultrafast quantum simulations using ultracold Rydberg atoms in the Bose-Einstein condensates and Mott-insulator lattice states. In the last five years here at IMS, I am pleased that I contributed to the development of ultrafast quantum simulator and carried out advanced research in the field of quantum science and technology. The overall journey was a magnificent experience for me with fruitful results. I am

quite certain that the experience and knowledge I gained at IMS will significantly assist me in my future career.

One of the highlights of our group is the atmosphere to pursue wonderful science. Everyone is always available for discussions. During the weekly group meetings, one can have feedback from all members on their work as well as keep track on the others research. In addition, we have additional learning activities like journal club and python club, which are quite flexible for participation.

The administrative staff of the group always do their best to make our life as comfortable as possible. I am grateful to the past members, present members and administrative staff for all the cooperation during my stay at IMS.

I moved to Okazaki with my wife Swati. Okazaki is a small city in central Japan, quite peaceful, surrounded by some amazing destinations. The incredibly beautiful cherry blossom season is the most awaited time of the year for everyone in Japan. It's very vibrant all-around and you will get to see Japanese people in their traditional attire. Overall spring is enthralling in Japan. We generally spend time in the evening near the Oto river. We also like visiting nearby beaches in Gamagori and Hamamatsu during weekends and holidays.

On the personal side, Okazaki will always hold a special place in our hearts because Avyan (our son who turned 3 recently) is born here. Some of the most precious moments of Avyan's early years have been captured in Okazaki. Among his favorite hobbies, feeding fish at the banks of Oto river as well as lake at Minami Park and playing at the Narai Park (especially with water during summer) are on the top.



Avyan, Swati and Vineet

There is a famous saying “change is the only constant”. And now it's time to say goodbye to Okazaki, our second home for last five years! We will soon move to Bristol, UK. We will forever cherish the wonderful time spent in Okazaki.

ありがとう ございました JAPAN !

アウトリーチ活動 子供向けイベント出展報告

コロナ禍が収束し、久しぶりに対面での催し物を開催する機会が訪れました。広報室では新しい試みとして、身近な体験を通して分子科学の存在を感じてもらいたく思い、子供向けのイベントへ出展しました。

文部科学省主催のこども霞が関見学デーで組み立て式分光器のキットの出展をしました。来場したお子さんたちに分光器を組み立ててもらい、様々な種類のライトを覗き込んでもらいました。日常にあるライトが異なる見え方をすることを通じて、発光する物質やその仕組みをどのように反映しているかを体験してもらいました。

また、岡崎青年会議所からの依頼による乙川河川敷でのOKAZAKI CRAFT FESにてスライム作りの出展を行いました。基本的に洗濯のりと硼砂溶液を混ぜてもらっただけで作ることが出来るシンプルなものですが、サラサラしている2つの溶液を混ぜるだけで固まる、という分子の相互作用により新しい機能が生まれる様子を体験してもらいたく思い計画しました。

両イベントともに、来場したお子さんにかなり楽しんでもらうことができ、賑やかなまま終わることが出来たと感じています。ただ、多くの参加者に対応する中で、分子に関する詳細な説明が十分に行えなかった点は反省材料ではありますが。今後は、より直感的に分子の存在を感じられるアクティビティを考案したいと考えています。

(広報室 記)



子ども霞が関見学デーの展示風景



2023年6月16日着任

山岸 芽衣

やまぎし・めい

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



2023年6月から、大森グループの事務支援員としてお世話になっております。大学卒業後、金融機関や飲食店で勤務してきましたが、この度夫の転勤に伴って愛知県に転居することになり、同研究室の牧野茜さんのご紹介でこちらに勤めることとなりました。未経験の分野での業務で慣れないこともありますが、学びの多い日々を過ごさせていただいております。皆様のサポートができるよう励んでまいりますので、どうぞよろしくお願いいたします。

2023年7月1日着任

白男川 貴史

しらがわ・たかふみ

理論・計算分子科学領域

計算分子科学研究部門 助教

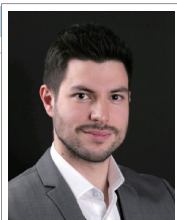


2021年に総合研究大学院大学で博士（理学）を取得後、北海道大学触媒科学研究所での日本学術振興会特別研究員を経て、2023年7月より江原グループの助教としてお世話になっております。専門は、量子化学です。分子研では、電子状態理論を基盤とした化学空間（分子・物質の組（タプル））とフル・フォック空間の理論的体系化と化学概念の抽出に取り組んで参ります。どうぞよろしくお願いいたします。

2023年7月1日着任

BRUNETEAU, Baptiste

社会連携研究部門 特任研究員



以前はフランスの会社でレーザーの研究開発エンジニアをしており、2023年5月にB. Boulanger先生の指導の下、光学の博士号を取得しました。レーザーとオプトロニクス技術に情熱を持っており、2023年7月から平等先生のグループで働き、学び続けられることを光栄に思います。

2023年7月1日着任

笠原 裕子

かさらは・ひろこ

生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門 事務支援員



2023年7月より加藤グループでお世話になっています。以前は総合電機企業にて、品質マネジメントシステムに関する国際規格ISO9001の事務局、家庭用から業務用までビデオカメラの生産計画や販売会社との連携など生産管理を担当していました。こちらでは新しい環境で、社会人として学び直す心構えで取り組んでいます。まさにプロフェッショナルに徹していらっしゃる先輩方に刺激を受け、勉強させていただいている日々ですが、研究室の皆さまにこれからお返していきたいと思っております。どうぞよろしくお願いいたします。

2023年8月1日着任

田村 光

たむら・ひかる

光分子科学研究領域

光分子科学第二研究部門 特任助教



2018年に博士課程を取得後、ミシガン大学及びパデュー大学での研究生生活を経て、2023年8月より大森グループの特任助教としてお世話になっております。これまでの経験を活かしつつ、新たな物理に出会うことを楽しみにしております。これからよろしくお願いいたします。

2023年8月16日着任

前島 尚行

まえじま・なおゆき

物質分子科学研究領域

電子構造研究部門 特任助教



2014年に奈良先端科学技術大学院大学で博士（理学）の学位を取得後、原子力機構、名古屋大学でのポスドク、立教大学での助教を経て8月から横山グループでお世話になっております。現在は超高真空中で金属基板上にリンの2次元原子層シートフォスフォレンや遷移金属リン化合物シートの作製を行い、その構造と物性について研究を行っています。どうぞよろしくお願いいたします。



NEW STAFF

新人自己紹介

2023年9月1日着任

野村 潤子

のむら・じゅんこ

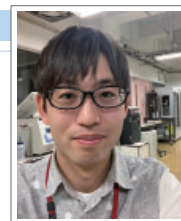
生命・錯体分子科学研究領域
生体分子機能研究部門 事務支援員

2023年9月より青野G / 飯野Gの事務支援員としてお世話になっております。企業に勤めた経験のみにて研究所という初めての職場で不安もありますが、先生方をはじめグループの皆さんや周りの方々に助けていただき、業務に取り組んでおります。心地よい業務の進行に努め、自分自身成長できるよう精進して参ります。どうぞ宜しくお願い致します。

2023年10月1日着任

堀内 滉太

ほりうち・こうた

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 助教

2023年に関西学院大学で博士（理学）を取得後、10月から秋山グループの助教としてお世話になっております。博士課程では、超高速レーザー分光法を用いた光合成色素（カロテノイド）の機能解明に携わっていました。分子研で新たな分野をスタートできたことを、心から誇りに思います。至らぬ点が多いかと思いますが、何事にも全力で挑みますので、今後ともどうぞよろしくお願い致します。

2023年10月1日着任

下ヶ橋 龍之介

さげはし・りゅうのすけ

光分子科学研究領域
光分子科学第三研究部門 特任助教

千葉大学で強磁性体での共鳴オージェ電子の研究により博士号を取得後、2023年10月より解良グループで特任助教としてお世話になっております。学生時代は無機物質を取り扱うことが多かったため、分子研では有機物質に関する知見を深めていきたいと思っております。これまでの光電子分光に関する実験・理論研究経験を分子研の更なる発展に生かしたいと考えておりますので、よろしくお願い致します。

2023年10月1日着任

WANG, Yu

メソ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 特任研究員

I am a postdoctoral research associate studying mesoscopic 2D materials using near-field optical spectroscopy. Before joining IMS on Oct 1 2023, I worked as a postdoctoral research associate for 3.5 years at Center for Quantum Nanoscience (IBS) in Seoul.

2023年10月1日着任

伊神 賢人

いがみ・けんと

研究力強化戦略室
特任専門員

2023年10月より大森研究室の事業化プロジェクト専任担当としてお世話になっております。9月末まで日本経済新聞社で企業経営や先端技術の取材をしておりました。量子コンピューティング技術の発展を人類の進化と発展、研究職・エンジニア職の魅力の増大につなげられるよう尽力させていただきます。よろしくお願い致します。

2023年11月1日着任

尾上 靖宏

おのうえ・やすひろ

協奏分子システム研究センター
階層分子システム解析研究部門 特任研究員

2009年に総合研究大学院大学で学位取得後、日本各地の大学を経て、2023年11月より秋山グループの研究員としてお世話になっております。前職の教育重視の環境から、分子研の研究パラダイスに移って気持ちが高揚しています。今後、生物時計について深掘りさせていきたいと考えております。どうぞよろしくお願い致します。

共同利用研究ハイライト

ヘムタンパク質におけるヘムの多機能性の起源の解明に向けた深層学習によるヘムタンパク質ポケット構造からの機能予測

鷹野 優 広島市立大学大学院情報科学研究科 教授

ヘムは鉄イオンとポルフィリンからなる金属補因子であり (図1)、ヘムを補因子に持つタンパク質をヘムタンパク質という。ヘムタンパク質は多くの生命体に含まれており、電子伝達、物質運搬、生化学反応触媒など極めて広範な生命現象を担っており、心疾患や脳内のコレステロール調整などにも関係することが報告されている。そのため、ヘムタンパク質の機能解明に向けた研究が精力的に進められており、例えば構造解析の分野では約6300ものヘムタンパク質の構造がProtein Data Bank (PDB) に登録されている (2023年11月29日現在)。しかしながら、活性中心のヘムは同一の基本骨格を持つにもかかわらず、取り囲むタンパク質の違いでこれほどまで多様な機能を発現する起源については明快な答えが得られていない。その解明にはヘムの包括的な研究が必要と考え、研究を進めている。

本レターでは、ヘムを取り囲むタンパク質ポケットの構造とタンパク質機能の関係を明らかにするため、深層学習を用いたヘムタンパク質のポケット構造からの機能予測に関する最近の研究成果について報告する^[1]。まずPDBからヘムa、ヘムb、ヘムc、ヘムoのいずれかを含み、分解能が2 Å以下の構造データを抽出した。これらの構造データから、軸配位子がアミノ酸残基または水分子である鎖を抜き出し、配列類似性に関して重複のないデータセットを作成した。タンパク質ポケットはヘムの座標をもとに決定した立方体領域とし、それを各辺の長さが1 Åの立方体 (ボックス) に分割してポケット構造を表現した。各ボクセル

ルには原子の有無により0または1の数値を割り当てた (図2左)。深層学習手法の畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network: CNN) を用いて、タンパク質ポケットの立体構造からタンパク質機能の予測を行い、タンパク質環境とタンパク質機能の相関を解析した。タンパク質機能の割り当てには、EC番号、遺伝子オントロジー、PDBファイル中の記述を用いた。機能予測では、酸素結合タンパク質 (OB)、酸化還元酵素 (OR)、および酸素結合と酸化還元反応触媒の二重機能タンパク質 (OB-OR) を解析対象とした。OB, OR, OB-ORについて2レベルでのクラス分類を行い、予測値と観測値の正確度を計算したところ、5回交差検証の平均値として0.959という高い精度が得られ、ポケット構造とタンパク質機能との相関が示唆された。混同行列の結果 (図2右) から、単一

機能のタンパク質については高精度に予測ができていた一方で二重機能 (OB-OR) の予測は難しいことがわかった。入力データの情報を部分的に削除し機能予測を行ったところ、タンパク質ポケットの外側から情報を削除した場合はすぐに予測の正確度が下がってくのに対して (図3A)、内側から削除した場合は20 Åほど削除しても予測の正確度は保たれていた (図3B)。このことから、ヘムの最近傍よりも離れたところの情報が重要であることが示唆された。また、タンパク質の空洞部分の構造の比較から、同一の機能を持つタンパク質でも空洞部分の構造にはばらつきがあることが示された。本研究で構築したCNNモデルでは、空洞部分の構造の類似性だけでなく、タンパク質機能に相関する構造的な特徴を抽出している可能性がある。

以上、ヘムタンパク質におけるヘムの

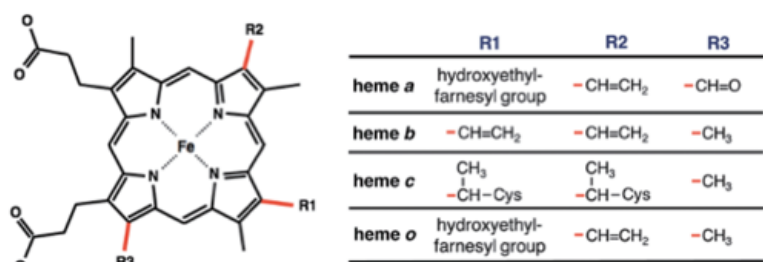


図1 ヘムの化学構造。

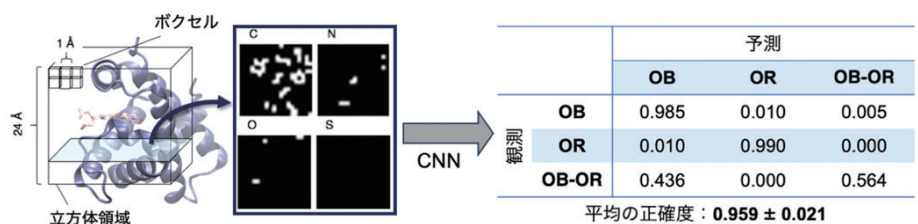


図2 CNNを用いたヘムタンパク質の機能予測。

多機能性の起源の解明に向け、構造データを包括的に取り扱う理論研究を行っている。ほかにも、包括的解析基盤となるヘムの構造データベースと統計解析ツールを統合したwebサービスであるPyDISH (Python-based database and analyzer for **DIS**tortion of **Heme porphyrin**) の開発 (<https://pydish.bio.info.hiroshima-cu.ac.jp/>)^[2] や、機械学習や量子化学、分子動力学シミュレーションを併用したヘムタン

パク質の研究も進めている^[3-7]。その実施には大量の計算資源を必要とし、計算科学研究センターの整備された計算環境は我々の研究推進の助けとなっている。今後も計算科学研究センターのサポートを受けることができれば幸いである。

本研究は、近藤寛子先生（北見工業大学工学部）、兼松佑典先生（広島大学大学院先進理工系科学研究科）との共同研究として実施された。



たかの・ゆう
2002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）の学位を取得。2002年日本学術振興会海外特別研究員、2004年日本学術振興会特別研究員、2005年大阪大学蛋白質研究所助教を経て、2015年より広島市立大学大学院情報科学研究科教授。専門は計算化学。

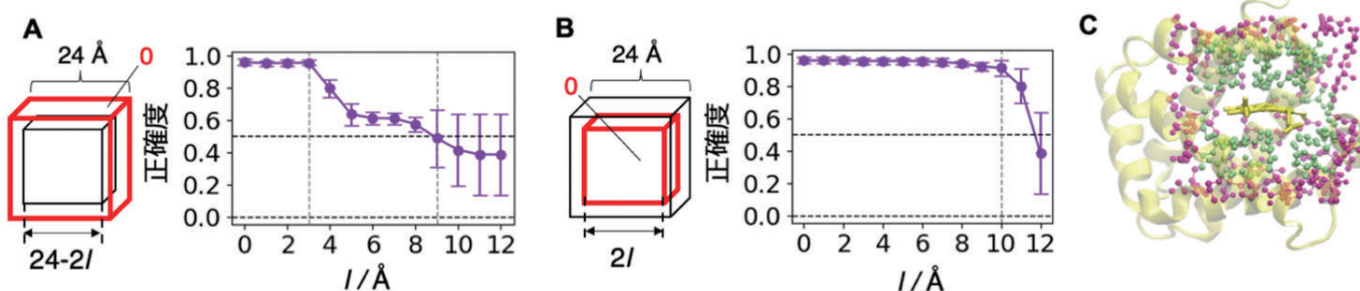


図3 (A) タンパク質ポケットの情報を外側から削除したときの正確度。(B) タンパク質ポケットの情報を内側から削除したときの正確度。(C) タンパク質ポケットを構成する原子 (PDB ID: 1A00)。黄緑の球が18 Åの立方体領域 (タンパク質ポケット) に含まれる原子。黄緑の球とマゼンタの球が24 Åの立方体領域 (タンパク質ポケット) に含まれる原子。

参考文献

- [1] H. X. Kondo, H. Iizuka, G. Masumoto, Y. Kabaya, Y. Kanematsu, Y. Takano, *Biomolecules* **13**, 137 (2023).
- [2] H. X. Kondo, Y. Kanematsu, G. Masumoto, Y. Takano, *Database* **2023**, baaa066 (2023).
- [3] Y. Kanematsu, H. X. Kondo, Y. Imada, Y. Takano, *Chem. Phys. Lett.* **710**, 108–112 (2018).
- [4] H. X. Kondo, Y. Takano, *Life* **12**, 210 (2022).
- [5] H. X. Kondo, M. Fujii, T. Tanioka, Y. Kanematsu, T. Yoshida, Y. Takano, *J. Chem. Inf. Model.* **62**, 775–784 (2022).
- [6] H. X. Kondo, H. Iizuka, G. Masumoto, Y. Kabaya, Y. Kanematsu, Y. Takano, *Biomolecules* **12**, 1172 (2022).
- [7] H. X. Kondo, Y. Kanematsu, Y. Takano, *Chem. Lett.* **51**, 704–708 (2022).

共同利用研究ハイライト

液体の統計力学理論による 生体分子の機能解析

吉田 紀生 名古屋大学大学院情報学研究科 教授

生命活動はタンパク質やDNAなどの生体分子が織りなす化学過程の連鎖であり、その化学過程は水以外にもイオンや小分子さまざまな成分を含む水溶液の中で起こっている。我々のグループでは、このような溶液中での生体分

子過程を対象とした理論化学手法を開発している。本稿では、分子研共同利用を通じて行った最近の開発事例について紹介する。

まず、溶媒分極を考慮した3D-RISM理論の開発について述べる。3D-RISM

理論は分子性液体の積分方程式理論の一つであり、分子研名誉教授である平田文男先生のグループで精力的に開発が進められてきた理論である（著者も博士研究員・助教として研究に参加していた）。この理論を用いることで生体

分子や高分子などの複雑な構造をもつ巨大分子の溶媒和構造・溶媒和熱力学量を計算することができる。3D-RISM理論では、溶質・溶媒間の二体ポテンシャルをもとに積分方程式を解くことで多体相互作用を考慮した溶媒和構造や溶媒和熱力学量を算出するが、これまでに溶媒分子の分極効果を取り入れた理論は開発されていなかった。液体の積分方程式理論に対して溶媒分極を考慮する方法としては、分極可能な分子力場を生成できるチャージレスポンスカーネル (CRK) をRISM理論に適用した手法が仲・森田・加藤らによって提案されている。^[1] RISM理論は、溶質・溶媒ともに相互作用点モデルを適用した理論であり、3D-RISM理論のように巨大な生体分子への適用は困難である。また、溶質・溶媒相互作用を作用点間の距離のみの関数として記述するため、空間上の位置の異方性について考慮する事が難しい。そこで、我々は3D-RISM理論にCRKを用いて溶媒分子の分極を取り込んだsolvent polarizable (sp) 3D-RISM理論を開発した。^[2] 溶媒分子は溶質との静電的な相互作用により分極するが、この分極はさらに周囲にある他の溶媒分子の分極も生じることになる (図1)。

Sp-3D-RISM理論では、このような多体相互作用を考慮した分極を記述することが可能である。また、この理論をもとに、非平衡状態の溶媒和自由エネルギーの計算手法および溶質の電子状態変化に伴う溶媒分極と溶媒配置の緩和ダイナミクス理論も開発している。^[3-5] この溶媒分極は溶質の電子移動を考えると、大きな影響を与えることが考えられ、現在これらの手法を用いて生体内電子移動過程の解析を進めている。

もう一つは、生体分子の効率的な構造サンプリング手法の開発である。3D-RISM理論では、溶質と見なした生体分子の構造から得られる溶質の構造エネルギーと、その構造に対する溶媒和エネルギーをもとに、系のハミルトニアンそして自由エネルギーを定義する。このように3D-RISM理論では、溶質の構造は言わば入力であり、溶質構造の変化・揺らぎを考慮するためには分子シミュレーション手法との組み合わせが必要となる。このような方法として、宮田・平田によるMD/3D-RISM法が挙げられる。^[6] この方法では、3D-RISMで求めた溶媒分布から計算される場での溶質の運動をMD法で計算する。このとき、

MDの1ステップの計算コストに比べて3D-RISM計算のコストが大きいために、外挿法を用いて溶媒力を近似したMD計算を行い、特定のMDステップ間隔ごとにのみ3D-RISM計算を行うことで、回数を低減させる方法が取られる。効率化のためにはこの間隔を大きくとることが好ましいが、その場合は外挿力の精度が低下し、本来求めたい3D-RISMハミルトニアンを満たす分布が得られない事が懸念される。そこで、我々はハイブリッドモンテカルロ法 (HMC法)を用いることで、3D-RISMハミルトニアンを満たした生体分子の構造サンプリング手法を開発した。^[7] この方法では、特定のMDステップ間隔ごとに3D-RISM計算を行い、直前の溶質構造のスナップショットに対する自由エネルギーを計算し、これと前回の自由エネルギーを比較、メトロポリス判定により新しい構造の採否を決定する (なお、このMDステップには任意の溶媒モデルを使うことができ、今回は計算の速い一般化ボルン法 (GB法)を用いた)。この方法により、従来法に比べ圧倒的に長いMDステップ間隔をとりつつ3D-RISMハミルトニアンを満たした構造サンプリングを可能とした。また、本手法の利点としては溶媒和自

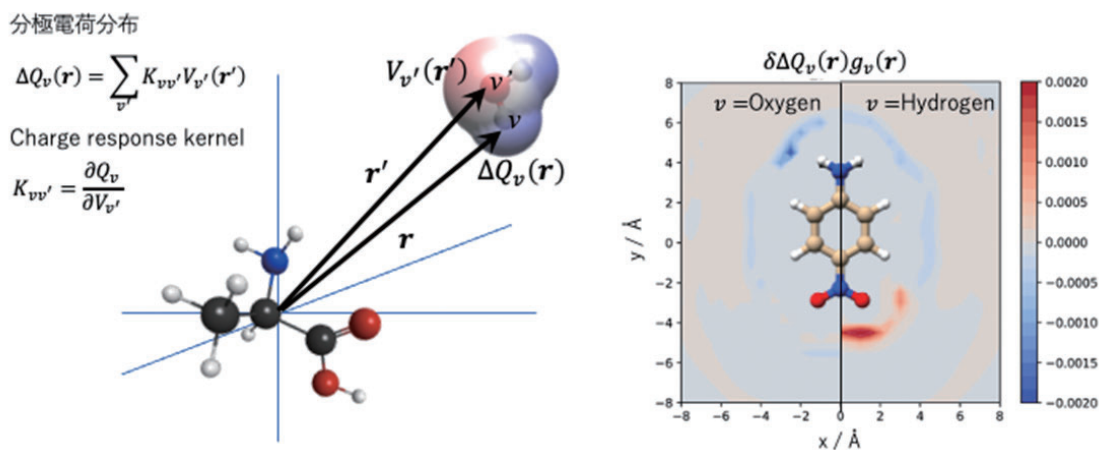


図1. CRKを用いた溶媒分子の分極電荷分布の概念図(左)とp-ニトロアニリンの周りの分極電荷密度分布(右)。p-ニトロアニリンの正に分極したアミノ基周りの溶媒水分子の酸素が負に分極し、負に分極したニトロ基周りの溶媒水分子の水素が正に分極していることが分かる。^[7]

由エネルギーの解析的微分が知られていないような任意の溶媒和自由エネルギー表式を利用可能な点も挙げられる。近年、3D-RISMの溶媒和自由エネルギーを高精度化する手法がさまざま提案されているが多くは解析的微分が知

られておらずMD/3D-RISM法の適用が難しい。^[8-10] HMC/3D-RISM法を用いることでこの困難も解決可能である。現在は、MD/3D-RISMをMD計算部分に採用した新しい方法の開発に取り組んでいる。



よしだ・のりお

2003年京都大学大学院理学研究科化学専攻にて学位取得後、株式会社富士総合研究所研究員、分子科学研究所博士研究員、同助教、九州大学大学院理学研究院准教授を経て、2022年3月より現所属。

参考文献

- [1] K. Naka, A. Morita, S. Kato, *J. Chem. Phys.* **111**, 481 (1999).
- [2] N. Yoshida, T. Yamaguchi, *J. Chem. Phys.* **152**, 114108 (2020).
- [3] T. Yamaguchi, N. Yoshida, *J. Chem. Phys.* **153**, 034502 (2020).
- [4] T. Yamaguchi, N. Yoshida, *J. Chem. Phys.* **154**, 044504 (2021).
- [5] N. Yoshida, T. Yamaguchi, H. Nakano, *Chem. Phys. Lett.* **797**, 139579 (2022).
- [6] T. Miyata, F. Hirata, *J. Comput. Chem.* **29**, 871 (2008).
- [7] N. Yoshida, T. Yamaguchi, *J. Mol. Liquids* **385**, 122418 (2023).
- [8] D.S. Palmer, A.I. Frolov, E.L. Ratkova, M.V. Fedorov, *J Phys-Condens Mat* **22**, 492101 (2010).
- [9] V. Sergiievskiy, G. Jeanmairet, M. Levesque, D. Borgis, *J. Chem. Phys.* **143**, 184116 (2015).
- [10] S. Tanimoto, N. Yoshida, T. Yamaguchi, S.L. Ten-No, H. Nakano, *J. Chem. Info. Model* **59**, 3770 (2019).

共同利用研究ハイライト

層状物質の放射光角度分解光電子分光 (ARPES)

田中 慎一郎 大阪大学産業科学研究所 准教授

放射光は物質研究者にとって様々な点で優れており、まさに「夢の光」である。現在仙台に次世代高輝度放射光施設 Nanoterasu が建築中であり、分子研では UVSOR が VUV 領域での世界屈指の高性能光源としての地位を築いている。放射光利用研究分野は多岐に渡り、分解能やエミッタンスなどの高性能化が進むとともに、測定自動化など使い勝手を向上させる努力が様々な形で行われている。しかし、例えば筆者が関わる角度分解光電子分光 (ARPES) は、固体の電子バンド構造を直接検出でき、その有効性は明らかであるものの、実験的な面でも解析の面でも一般の物質科学者にとってはハードルが高い。そこで、物質専門の研究者が、手法に詳しい研究者と共同研究を行うことは、放射光利用研究の発展

にとって大きな意味があると考えられる。後者のタイプの研究者である筆者は最近、熱電物質の専門家である東北大多元研鈴木講師と分子研 UVSOR で共同研究を行う機会を得た^[1-3]。本稿では、この共同研究の成果を紹介する。

本研究でターゲットとなったのは、熱電材料や太陽電池の候補物質として大きな発展性が見込まれている SnS および S を Se に置換した混晶である SnS_{1-x}Se_x である。SnS と SnSe は構造も電子状態も互いによく似た半導体である。SnS(SnSe) の結晶構造とブリルアンゾーンを図 1 (a,b) に示す。図 1 (c) で示したように、価電子帯トップ (VBM) が Γ -Z (X-U) 軸上に存在し、 Γ -Y (X-S) 軸上には、VBM よりもエネルギーがやや低い局所的トップ (VBM1) が存在する。熱電物性を考え

る際に最も重要なのは、電荷を運ぶこれらのバンドの性質である (高温では VBM だけではなく VBM1 も重要である)。そこで、放射光 ARPES を用いた研究を行った。

【1】 ARPES による SnS-SnSe 固溶体のホール有効質量の直接決定^[1]

SnS-SnSe 固溶体 (SnS_{1-x}Se_x) は、 $x \sim 0.1$ で元物質の SnS、SnSe よりも高い熱電性能を持つ^[4]。有効質量近似を用いると、ホールの質量を m^* としたとき価電子のエネルギー E は結晶運動量 k の関数として

$$E = E_{VBM} - \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$$

となるので、分散測定により直接ホールの有効質量を求めることができる。SnS において k_y 方向で測定した ARPES の例を図 1 (c) に示した。求めたホール有効質量を固溶体の組成比によってブ

ロットしたものが図 1 (d) である。VBMの有効質量の異方性やVBMとVBM1の大小関係が組成比依存性を強く持つことが明確であり、この結果は熱電素子設計に重要な示唆を与える。

【2】 ARPESによるSnS価電子帯へのSn 5s軌道の寄与の観察^[2]

価電子帯、特にVBMのバンドの構成電子軌道についての知見は、太陽電池・熱電材料設計にとって重要な指針となる。光イオン化確率の光エネルギー依存性は、原子軌道ごとに異なっている。これを利用し、光エネルギーによるピーク強度の変化を観測して、第一原理計算（計算科学研究センターを利用し筆者が行った）とも比較することでVBM

およびVBM1が主としてSn 5s軌道から構成されていることを示した。

【3】 偏光を利用したSnS価電子帯の原子軌道の同定^[3]

バンドを形成する原子軌道の対称性と励起光の偏光方向に応じて光電子強度は強く変動する。放射光の偏光と結晶軸の組み合わせを変え、ARPESの光電子強度の変化を観測し、バンドを形成する原子軌道の同定を行った。第一原理計算とも比較し、この同定が妥当であることを確認した。

これらは、SnS(SnSe)という応用的に重要な物質について、放射光ARPESの1) バンド分散を直接検出できる、2)

励起エネルギーを自由に制御できる、3) 励起光の偏光を自由に制御できる、という特徴を生かしその基礎物性を詳しく調べた研究である。物質に詳しい研究者と手法に詳しい研究者の共同作業が放射光分野において今後とも発展していくことを期待する。

謝辞：本研究は分子研UVSORのBL5Uおよび7U（課題番号：2020-756）で行われました。田中清尚先生の手厚いサポートに深く感謝いたします。また、第一原理計算は分子研計算科学研究センター（課題番号：21-IMS-C161）で行いました。

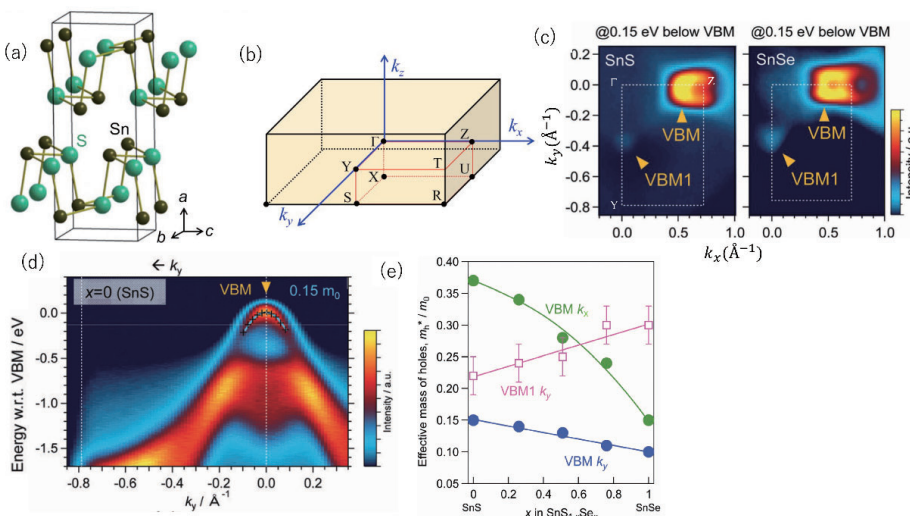


図 1：(a,b) SnSの結晶構造およびブリルアンゾーンの模式図。
 (c) SnSおよびSnSeのVBM付近の光電子強度の2次元マップ。
 (d) SnSのARPES像。VBM付近に有効質量近似によるプロットを記している。
 (e) ARPESで求めたSnS_{1-x}Se_xのホール質量の組成比依存性。



たなか・しんいちろう
 京都大学理学部で博士課程を修了後、分子科学研究所UVSOR助手、名古屋大学理学部物理学科助教授を経て大阪大学産業科学研究所准教授。高分解能電子エネルギー光電子分光で学位を取得後、放射光やレーザーを用いた電子分光によって固体表面や低次元系物質の電子物性を研究しています。最近は第一原理計算やPythonによる解析ソフトウェア開発も行っております。研究以外では歌を歌ったり料理をすることが好きです。

参考文献

[1] I. Suzuki, Z. Lin, S. Kawanishi, K. Tanaka, Y. Nose, T. Omata and S. Tanaka, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **24** (2022) 634.
 [2] I. Suzuki, S. Kawanishi, K. Tanaka, T. Omata and S. Tanaka, *Electron. Struct.* **4** (2022) 025004.
 [3] I. Suzuki, S. Kawanishi, K. Tanaka, T. Omata and S. Tanaka, *Phys. Status Solidi B* (2023) 2200408.
 [4] H. Wenke et al., *Science*, **365** (2019) 1418.

電子機器の小型化の需要に応えるため、ICをはじめとする電子部品の小型化は著しく、プリント基板に貼り付けるように実装する表面実装タイプのみが製造・販売されることも珍しくありません。それに伴い、ICのピン間隔も1.27 mmから0.65 mm、さらには0.5 mmなど狭小化の一途を辿っています。

装置開発室では、プリント基板の小型・高密度化による配線インピーダンスの減少や高速動作への対応のため、1990年代後半から表面実装タイプの部品を導入し、実装技術の取得・向上に努めていますが、従来のプリント基板加工では狭小な配線の加工精度が十分でなく、特定の領域を繰り返し加工する必要が生じる場合があり、効率の低下や配線の欠損などの課題がありま

した。

近年、装置開発室は従来機にはない性能を備えたプリント基板加工機を導入しました（図1）。本加工機は、高出力スピンドルの採用により、ツール先端に十分な力を加え、かつ安定した高速回転によって加工精度を高めることが可能となっています。

本加工機によるプリント基板の加工例を図2、3に示します。0.65 mmや0.5 mmといった狭小なピン間隔も高精度で加工できるため、効率性を高めるとともに実装時のはんだショートのリスクを低減できます。また、高速性能により、図4のような大型のプリント基板を従来比約1/2～1/3の時間で加工できます。BNCコネクタなども一体化したプリント基板を高速・高精度で製

作できるため、試作評価の迅速化や少量量産の効率向上が可能になりました。

ICの小型化やピン間隔の狭小化は、信号の検出や増幅の要となるオペアンプなどアナログICも例外ではありません。アナログ回路における高速動作や高精度の実現には配線インピーダンスの低減が重要ですが、そのためにはピンが短い、すなわちピンのインピーダンスを低く出来る表面実装タイプの部品の採用が不可欠と言えます。

最近、装置開発室の工作依頼ではアナログ回路の比重が高まっています。現場の需要により正確かつ迅速に答え、かつ信頼性の高いプリント基板の設計・製作を進めていきたいと思えます。

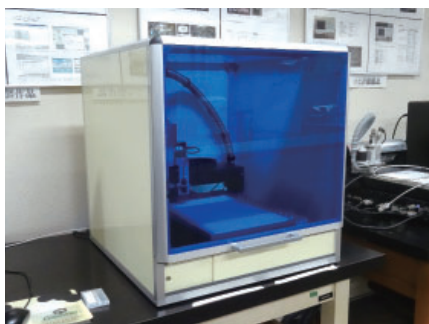


図1：導入された新型プリント基板加工機の外観

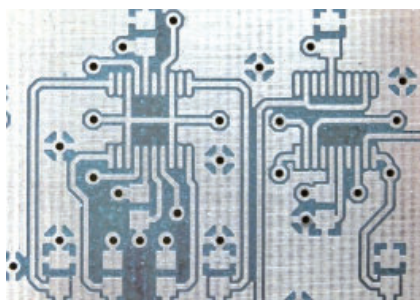


図2：プリント基板の加工例（1）
ピン間隔0.65mmのTSSOP
パッケージICと周辺部品

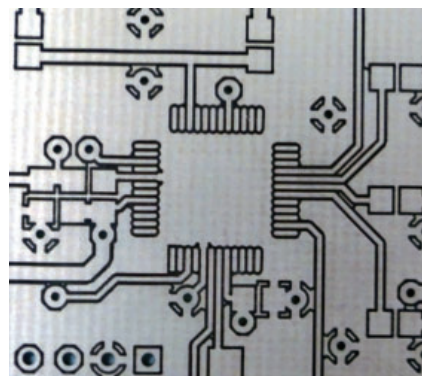


図3：プリント基板の加工例（2）
ピン間隔0.5mmのLQFPパッケージICと周辺部品

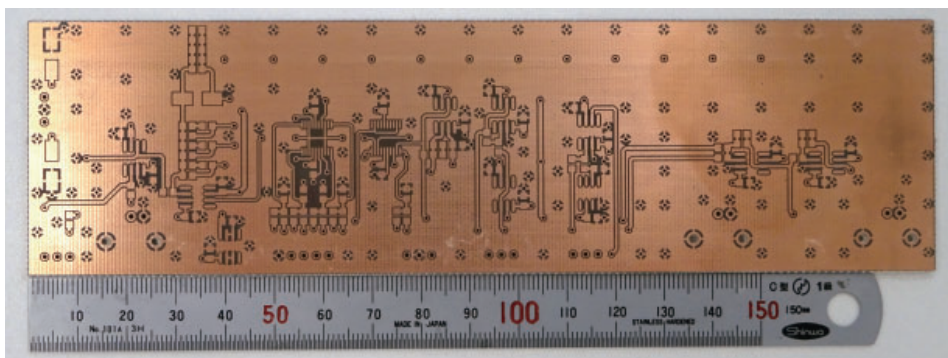


図4：プリント基板の加工例（3）
BNCコネクタまで一体化した
186.0mm×52.0mmのプリント基板

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が、2023年には漸くコロナ禍も一定の落ち着きを見せ、従前のような対面式の研究会や協力研究が可能となった。コロナ禍の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UVSORにおける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の世界的にも優位性のある共同利用を展開してきた。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着実に実りつつある。2022年度まで実施してきたナノテクプラットフォーム事業は2022年度よりマテリアル先端リサーチインフラ事業（Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology：略称ARIM）へと刷新され、継続的に発展しつつある。コロナ禍においては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。

しかしながら2023年度にはポスト・コロナ、ウィズ・コロナの生活の形が見えてきたにも関わらず、残念ながら共同利用件数が、その中心的アクティビティである協力研究、研究会ともに減少している。これは昨年度までにリモートでの共同研究や研究集会を実施することが定着しon-site型の共同利用が第一選択肢にならなくなっていることを示しているのかもしれない。また近年の卓越大学院プログラムや国立大学法人の統合、地域的な大きな枠組みでの大学間連携の推進など、大学での研究を取り巻く環境は大きな転換点に来ている。大学共同利用は分子科学研究所の生命線の一つであることから、どのような形態の共同利用が望まれ、利用しやすいのかなどを見直し、独自性ある有効な共同利用のあり方を目指したい。

共同利用研究の実施状況（採択件数）について

種 別	2017年度	2018年度	2019年度	2020年度	2021年度	2022年度	2023年度 (12月7日現在)
課題研究	2	4	2	2	2	4	1
協力研究	73	45	37	53	47	47	33
協力研究（マテリアル） ^(注3)	64	81	69	44	66	38	28
協力研究 (NMRプラットフォーム) ^(注4)	-	-	-	-	3	0	0
分子研研究会	9	10	7	4	4	5	6
若手研究活動支援	2	1	2	1	2	1	0
岡崎コンファレンス	0	1	2	0	0	0	0
計	150	142	119	104	124	95	68

(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、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
2023年6月14日～15日	化学・工学・環境学を例とした持続可能な社会のための産学官民連携のあり方	所 千晴（早稲田大学理工学術院／東京大学大学院工学系研究科）	49名
2023年7月29日～30日	明日の放射光光電子分光研究展開のシーズとニーズ	松井 文彦（分子科学研究所 極端紫外光研究施設）	61名
2023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）	128名
2023年9月13日～14日	イオン液体インフォマティクスの発展にむけて	北田 敦（東京大学）	37名
2023年9月29日	UVSOR-Spring8 赤外ビームライン合同ユーザーズミーティング	田中 清尚（分子科学研究所 極端紫外光研究施設）	63名
2023年10月2日～4日	溶液の化学現象の軟X線分光測定の前線	長坂 将成（分子科学研究所 光分子科学研究領域）	60名

関連学協会等との連携

「日本表面真空学会」と分子研の連携の重要性

大門 寛 分子科学研究所 UVSOR 特別協力研究員

公益社団法人日本表面真空学会は、表面・界面の科学、真空技術、プラズマ・薄膜、ソフトマター・バイオ界面まで、幅広い分野をカバーする学会です。会員数は1700名程度の中規模の学会です。2018年までは「日本表面科学学会」と「日本真空学会」に分かれて40年以上長く活動していましたが、私が「日本表面科学学会」の会長を務めていた2018年4月に合併して新しく日本表面真空学会として出発しました。とても元氣な学会ですが、その理由として、表面真空科学という分野が、化学、物理、分析、応用に渡って大きく発展していることが挙げられます。

表面・界面の研究においては、無機・有機・バイオ物質の機能の原子レベルからの解明を行っています。分子研では、物質が示す多様な物性を、構成分子の働きを原子レベルから解明することによって理解する研究が行われているため、原子レベルでの解析という点が共通しており、日本表面真空学会と分子研の連携は双方にメリットをもたらすと思います。

表面への分子の吸着の研究は「触媒」研究に直結しているため、Langmuirが1932年にノーベル化学賞を受賞したころから現在まで精力的に研究されている分野です。2007年にはG. Ertl博士が光電子顕微鏡 (PEEM) を用いてCOの酸化反応を可視化してノーベル化学賞を受賞しています。

その間の1982年にG. BinnigとH. Rohrerによって発明された走査型トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscope (STM)) と、その発展形のSPM (Scanning Probe Microscope)

は、表面科学に大きな変革をもたらしました。BinnigとRohrerは、1986年にノーベル物理学賞を受賞しています。今では原子の凹凸を見るだけでなく、原子の種類や原子ごとのスペクトルまで測定できるようになり、広い分野で原子レベルの物性測定に使われています。最近では分解能がさらに上がり、分子内部の分子軌道の観測までできるようになってきました。

SPMは真空との界面 (表面) だけでなく、液相と固相の界面も見ることができます。電池の電極反応や、バイオ物質の観察などが行われています。高速原子間力顕微鏡の開発によるミオシン分子の動態可視化の業績に対して、金沢大学の安藤敏夫先生に2009年度の日本表面科学学会賞が授与されています。

分子研の先生方は本学会の賞を多数受賞されていますのでここでまとめて紹介します。2005年度には川合眞紀先生が「固体表面における単分子の動的挙動に関する研究」で日本表面科学学会賞を受賞されており、2017年度には、松本吉泰先生が「新規レーザー分光法による吸着種の構造とダイナミックスの解明」で同じく日本表面科学学会賞を受賞されています。また、以前分子研に在籍していた間瀬一彦先生が「コインシデンス分光法による表面ダイナミックスの研究および表面物性に基いた新規非蒸発型ゲッターの開発」で昨年 (2023年) 度日本表面真空学会賞を受賞されています。

また、若手女性研究者優秀賞の制度を2020年度に創設しましたが、第一回の日本表面真空学会若手女性研究者優秀賞を南谷英美先生が「表面界面に

おける量子多体効果の理論研究」で受賞されています。

さらに、STM創始者のRohrer先生は日本に頻繁に來られて日本の表面科学に大きく寄与して下さったため、日本表面科学学会では国際賞としてHeinrich Rohrer Medalの授与制度を2013年に創設し、3年に一度開催している表面の国際会議ISSS (International Symposium on Surface Science)において表彰しています。Grand Medalと、37歳以下の若手に与えられるRising Medalがあります。この賞は、Rohrer夫人の多額のご寄付、IBM Zurich研究所とスイス大使館の全面的協力を得て、国際的に募集、審査を行っています。分子研ではThe 3rd Heinrich Rohrer Medal -Rising Medal- (2020) を熊谷崇先生が受賞されています。このRohrer Medalの受賞業績はSPMに限られているわけではなく、光電子分光の方も受賞されていますが、結果としてSPM関係が多くなっています。

ここで、表面物理関係の話題について述べます。超伝導体は固体内部 (バルク) の性質ですが、表面だけで起きる2次元超伝導も発見されています。T_cが100Kを超える表面一層のFeSe超伝導体も報告されました。以前から、表面において現れるRashba分裂したスピンバンドが見出されていましたが、2016年のノーベル賞であるトポロジカル物質の発見以降、表面にしか存在しないスピン流という有用な新しい物理が大きく花開いています。

ここで、国際関係について述べま

す。表面科学を取りまとめている国際組織はIUVSTA (International Union for Vacuum Science, Technique, and Applications国際真空科学技術連合) という団体です。3年ごとに世界各地で国際会議 (International Vacuum Congress) を開催しています。2022年の9月には、本学会が主催して札幌でIVC-22を開催しました。IUVSTAの中には9つのTechnical divisions (Applied Surface Science, Biointerfaces, Electronic Materials & Processing, Nanometer Structures, Plasma Science and

Technologies, Surface Engineering, Surface Science, Thin Film, Vacuum Science and Technology) があります。ここでも分子研の先生方は活躍されています。川合真紀先生は、Surface Science DivisionのChairを長年務められました。湊丈俊先生はApplied Surface Science Divisionの次期の日本代表です。

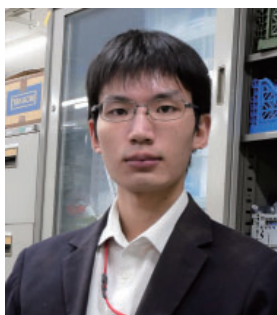
また、学会の運営においても、松井文彦先生には出版委員会で、杉本敏樹先生には若手研究部会で大変お世話になっており、有難うございます。

以上、分子研の方との関係を軸にし

て日本表面真空学会の紹介を致しました。お名前が抜けている方にはご容赦をお願いしたいと思います。また、内容も、私の専門の表面科学に偏っていますが、分子研との研究連携に必要なことは書けたように思います。これまでも分子研の先生方には日本表面真空学会の重要な活動を支えていただいています。今後も連携して行くことによって相互に高め合う関係が続けられることと思います。今後とも、分子研の皆様のご協力をどうぞよろしくお願い致します。

分子研技術推進部

分子研レターズ88号の技術推進部のコーナーに掲載された新人技術職員の自己紹介記事がとても新鮮！という声が編集委員会に届きました。今号では若手技術職員の自己紹介記事を掲載します。担当する装置や業務内容について記載されています。



初等技術職員？ 装置開発ユニット 木村 和典

装置開発室エレクトロニクスセクションにて務めております木村和典と申します。豊田工業高等専門学校本科を卒業後の2018年4月に特任専門員として採用いただき、同10月から技術職員としてお世話になっておりますので、この4月で在籍7年目になります。

装置開発室エレクトロニクスセクションでは回路工作全般—ケーブル1本の作成から電気・電子回路を用いた装置全体の設計・製作、検証まで幅広く手掛けております。学生時代は電気系の学科に所属しつつ課外活動で参加していたロボット製作で主に機械工作を担当していました。そのため着任当初より「装置・筐体に収めるもの」としての回路工作を行うことを意識してきました。たとえば機械系3D CADを回路CADと連携させて容易に組立・解体できるような形状・配置の設計にしたり、回路系職員が手動工作機械を使っていた筐体加工作業に卓上CNCフライスを導入して回路設計に集中できるようにしたりと、細々と活動しております。

ハードウェアに限らず、装置に組み込むマイコンや、装置を接続するパソコン側のプログラムを作成する場合があります。装置開発室内で工作依頼を管理する内製システム、外部向けホームページの維持管理・開発も着任2年目ごろから引き継いで担当しています。

着任から初等教育に相当する年数を経て半端に経験を積んだためか、製作における思想らしきものを自覚するようになりました。技術者としても技術職員としても未熟な身ですので、これに拘泥することの無いよう引き続き務めてまいります。どうぞよろしくお願い致します。





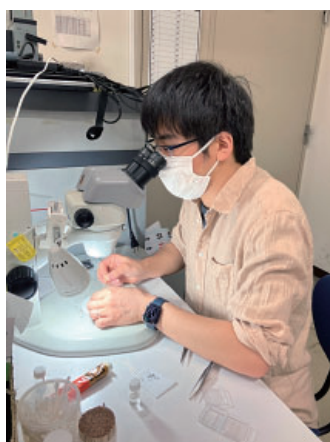
今後ともよろしくお願いたします

機器分析ユニット 浅田 瑞枝

機器分析ユニットにて、寒剤供給管理と電子スピン共鳴（ESR）測定関連の業務を担当して5年目になります。特任助教だった頃も含めると分子研に所属して8年目になります。以前はESRを使ったタンパク質の構造・機能解析の研究を行っており、ユーザーとして機器センターの実験設備を利用していました。現在はESR装置の協力研究の測定などを担当しています。測定に関しては手応えを感じることもありますが、知識や技術がまだまだ未熟だと感じることも多々あり、少しでも皆様のお力になれるよう引き続き精進していきたくと思います。

素人のコーディングですがPythonによるARIM用のESRデータ構造化（バイナリーテキストのデータ変換、測定パラメータの一覧化など）もお手伝いしています。Pythonについては、業務効率化のためのプログラムを技術推進部かなえ36号、37号にて報告しましたので、ご興味のある方はお声かけください（かなえ：<https://tech.ims.ac.jp/kanae>）。

また、機器センターでは、実験で使用したヘリウムを回収・再液化して潤沢に利用できる環境を整えています。寒剤担当になって初めて回収・液化業務に携わり、空圧弁の作動音に驚くことも多かったのですが、ようやく装置の仕組みや高圧ガス配管のガスの流れを理解して、ビビらずに作業できるようになってきたと思います。ヘリウムガスは様々な要因から供給が不安定になりやすい資源ですが、低温測定や高磁場実験には欠かせないので、可能な限りユーザーの皆様へ安定的に供給できるよう努めて参ります。今後ともどうぞよろしくお願いたします。



装置の利用と管理

機器分析ユニット 宮島 瑞樹

私は2021年4月より機器センターで働いています。いわゆるコロナ禍に入所したので、制限が緩和された今でもマスクは仕事着の一部となっています。

学生時代にはアルカリ金属超酸化物の磁性について研究を行っており、SQUID磁化測定装置 MPMS を主に利用していました。また、分子研と同じ大学共同利用機関法人である高エネルギー加速器研究機構の特別共同利用研究員となり、利用者としてフォトンファクトリーにて放射光X線回折（XRD）実験を行っていました。

現在の主な業務はMPMS、熱分析装置TG-DTA/DSC、電子スピン共鳴（ESR）装置、粉末XRD装置の管理とユーザー対応です。毎週MPMS、ESR装置への液体窒素、液体ヘリウムのトランスファーを行っています。時折、スペックの確認のために標準物質の測定を行います。装置についての詳細は、機器センター HP (<http://ic.ims.ac.jp>) や『機器センターたより』 (<http://ic.ims.ac.jp/tayori/> 機器センターたより No.15.pdf) をご参照ください。

さて、装置を利用する側から管理する側になってから、利用しやすさと管理について考えることが多くなりました。基本的にはユーザーの希望通りに利用していただきたいのですが、装置の管理面からすると制限をせざるを得ないこともあります。最先端の研究では自由度の高い実験（in-situの実験や、特殊なガスを流したいなど）が必要となるのは分かるのですが、機器センターの装置は共同利用の装置であり、装置に不具合が生じてしまった場合、他多数のユーザーの実験に影響してしまいます。現在のところ、装置の管理を優先しており、中々ユーザーの希望通りにはできていないのが悩みです。



MPMS3



訃報

水谷伸雄氏 逝去

昭和54年	分子科学研究所	管理局	技術課	装置開発室	文部技官
平成9年	分子科学研究所	技術課	第三技術班	装置開発技術係	機械技術主任
平成10年	同	第二技術班	極端紫外光科学研究係	技術係長	
平成17年	自然科学研究機構	分子科学研究所	技術課一班	機器開発技術係	係長
平成19年	同	技術課	機器開発技術班	機器開発技術係	係長
令和3年	同	技術課	機器開発技術班	機器開発技術係	退職
令和3年	技術推進部	装置開発ユニット			再雇用職員

近藤 聖彦 (技術推進部 装置開発ユニット)

2023年11月13日(月)、出勤時間の8時30分を過ぎて、装置開発室職員の行動予定表(Zaiseiki)が表示されたモニター画面を見ると、水谷さんのステータスは「帰宅」でした。普段であれば当然「在席」となっている時間です。当日休暇を取得される場合、必ず電話連絡があるのですが、この日は何の連絡も有りません。少し心配になりましたが、水谷さんからの連絡を待つことにしました。8時55分頃に装置開発室の受付の電話が鳴った時、水谷さんからの休暇の連絡だろうなと思いました。別の職員が電話を取り対応しましたが、直ぐに私に代わることになりました。電話の主は息子さんとのこと。「どうしたのかなあ」と思った次の瞬間、突然の訃報の知らせでした。しばらく、言葉が出ませんでした。耳を疑い、信じられず、何かの間違いであって欲しいと心から願いましたが、願い叶わず永遠のお別れとなってしまいました。水谷さんは11月10日(金)に休暇を取得されていたので、その前日に装置開発室・機械グループの活動方針を相談したのが水谷さんとの最後の会話となってしまいました。亡くなる1週間前の11月6日(月)に数名の食事会で、一緒に楽しく談笑できたことがせめてもの心の救いです。

召天式の際、牧師さんが、「水谷さんは、時間に遅れない、好奇心旺盛、用意周到、アイデアが豊富、人を助ける、兄弟」と紹介されていました。職場の関係者のみならず、所属されていた教会関係の友人・知人から幅広く頼られ、愛されていたことを改めて知りました。水谷さんの多彩な趣味の一つに、写真撮影があります。その腕前は拔群であり、装置開発室の集合写真や記録写真の撮影にとどまらず、他部署からも引っ張りだこで、所内行事ではいつも水谷さんが写真撮影をされていました。カメラマンの宿命とは言え、水谷さんご本人の写っている写真がとても少ないのが、今となっては心残りです。

水谷さんはモノづくりにこだわりがありました。愛用の旋盤Leoと静岡製鉄所のフライス盤を自在に操作され、加工に妥協を許さない人でした。さらに、グラインダなどで独創性豊かな工具を自作され、他者には真似のできない実験装置、実験部品などを数多く開発・作製されてきたことが認められ、令和元年に化学技術有功賞を受賞されました。

最近では実験装置の組み立て作業を水谷さんと一緒におこなっていました。その際、水谷さんが設計を担当された機構について重要な勘所を教えてくださいました。これからも水谷さんと一緒に作業をしながら、水谷さんがお持ちの技術と技能を学ばせていただきたかった。その機会が永遠に失われてしまったことは、本当に残念でなりません。

悲しんでばかりいては、水谷さんの装置開発室への思いを引き継げません。装置開発室が分子科学コミュニティにこれまで以上に貢献している姿を見せられるよう室員一同、日々前を向いて進んでいきたいと思っております。水谷さんの長年のご功績、ご活躍に心から敬意と感謝の意を表し、安らかなる眠りをお祈りいたします。

鈴木 光一（元技術課 技術課長）

水谷さんは所内の同僚や親しい教員の皆さんから「ピカピカ」とあだ名で呼ばれていました。このあだ名は、1980年頃に小学1年生という学習雑誌のテレビCMで「ピカピカの一年せい〜♪」が流行っていて、新人で入ってきた水谷さんに、当時分子研の先輩職員の岡田則夫氏（現 国立天文台）が「おーい、ピカピカ！」と呼んだのが始まりです。このあだ名は本当によく浸透し、当の本人はどう思っていたか判りませんが、そう呼ばれても笑顔が返ってきて常にいい雰囲気を作り出していました。最近でも多くの分子研OBが年配の水谷さんに親しみを込めて呼んでいました。これがもう聞こえなくなり、ピカピカと言えなくなるのは本当に寂しいことです。ご冥福をお祈りします。

岡田 則夫（国立天文台 特定技術職員）

水谷さんとは40余年の仕事仲間です。彼は汎用工作機械を駆使した精密加工を得意とし、また真空装置作りの要である溶接の腕前も凄かったです。堅実さと拘りの「ものづくり」で装置開発室の初期から鈴木さんらと活躍し続けました。物腰は柔らかくでいつもニコニコと話が弾みました。私が天文台に転勤した時は三鷹まで引越しの手伝いに来てくれて、おまけにレンタカーの4トントラックを岡崎まで運転して返しに行ってくれました。大変頼もしい存在でした。つい最近もアルミ製フランジのO-リング溝の研磨について情報交換をしたばかりでした。突然の訃報に大変驚いています。来世があるなら、また一緒に仕事がしたいと思っています。

吉田 久史（元技術課 電子機器開発技術班長）

水谷さんのあまりにも突然の悲報が届いたのは友人からのメールでした。今でも信じられません。いつも心穏やかで朗らかな誰からも愛される、また、繊細で実直なものづくりをする人でした。工作の相談事や工作機械の操作方法等、困った時はいつも水谷さんを頼りにしていました。階段を駆け降りて、工場の扉の向こうに水谷さんを見つけた時のほっとした感情をよく覚えています。いつも優しく対応して頂き、ありがとうございました。心からご冥福をお祈りいたします。



2008 産総研



2009 旋盤Leoと水谷氏



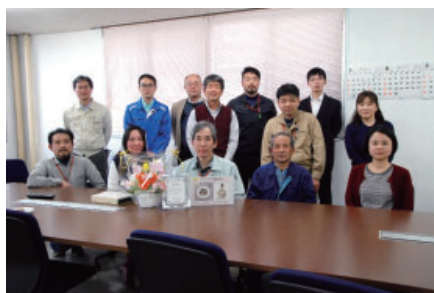
2011 安全講習会



2020



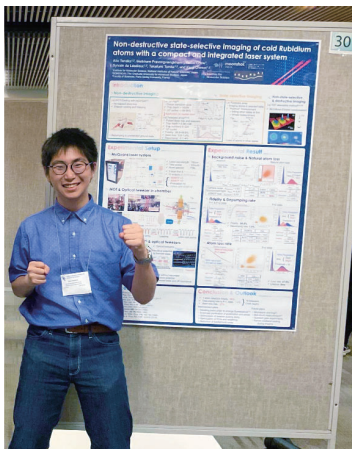
2023



2019 化学技術有功賞の祝賀会



2023.11.6 食事会



国際学会（Gordon Research Conference, Quantum Control of Light and Matter）への参加

田中 愛登

総合研究大学院大学 先端学術院先端学術専攻 分子科学コース
5年一貫制博士課程1年

たなか・あいと

東京大学工学部物理工学科を卒業後、2023年4月に総合研究大学院大学分子科学コースへ入学、大森グループにて光ピンセットアレイ中の冷却中性ルビジウム原子を用いた量子コンピューター・量子シミュレーターの開発に取り組んでいる。

2023年8月6日から11日にかけて米国ロードアイランド州のSalve Regina大学で開催された国際学会「Gordon Research Conference, Quantum Control of Light and Matter」に参加しポスター発表をさせていただきました。私の所属する研究室の大森賢治教授が本学会の議長を務める事もあり大森グループからは計7名が参加しました。現在私は、冷却中性原子を用いた量子コンピューターの実現に向けた研究の一環として、ルビジウム87原子の基底状態の超微細構造準位を識別する蛍光イメージングに取り組んでいます。特に、測定中の原子の状態変化やロスを抑制する為には、測定に用いるレーザー光の偏光・

離調や強度を正確に調整し、光子を吸収・放出する際の反跳加熱効果も抑制する必要があります。また、我々は将来的な量子コンピューターの製作に向けた安定的に動作する光源として、光ファイバーと小型光学系を用いた仏Muquans社製のレーザーシステムを導入しました。本学会では、性能評価の一貫としてこのレーザーシステムを用いて状態選択的な蛍光イメージングを行い、測定中の原子の状態変化やロスを抑制した結果について報告しました。現地では、米国に限らず世界各国から量子技術に関連する研究者・学生が一堂に会し、ポスターセッションや講義後の質問を通じて活発な議論が由来ました。特に対面で参加することによって、ライバルとなる世界の同世代

の博士課程学生と交流し、海外の各研究グループの現在の方向性や進捗状況について情報を得られるなど非常に有意義な時間でした。初めての国際学会ではありましたが、海外からのインターン学生が多く訪れる大森グループの環境もあり、苦手意識を持つ事なく英語での発表が出来た事は自らの自信となりました。様々な刺激を受けて研究へのモチベーションも高まり、さらなる研究成果を目指して今後も日々精進していきたいと思います。最後に、今回の研究の遂行と国際学会の参加にあたり、御指導いただきました大森先生をはじめ、御支援・御尽力いただきました「Moonshot目標6」及び分子研・大森グループの関係者の皆様にこの場を借りて心より感謝を申し上げます。



My experience at Gordon Research Conference (GRC) 2023

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh

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5年

I joined Prof. Kenji Ohmori's group in 2018 October as a Ph.D. student. Our group is building a platform for ultrafast quantum computation and simulation using interactions between cold Rydberg atoms.

I participated in Gordon Research Conference (GRC) from August 6 – 11, 2023 on topic of “Quantum Control of Light and Matter” organized in Newport,

Rhodes Island, United States. This conference focused on advancing the frontiers of science through presenting cutting-edge research and interaction

among scientists of all career stage.

In GRC 2023, I also got opportunity to present a poster on my experimental work about generation of 480 nm stable pulse laser for high-fidelity ultrafast excitation of atoms to Rydberg states. I considered GRC as a great platform for discussion and sharing about my work. In GRC, I found interesting lectures about quantum metrology using atoms and superconducting qubit. I really enjoyed lectures and this also helps me to learn new techniques and physics that can be done with neutral atom platform for quantum computation and

simulation.

This venue is an island so it is highly recommended to go nearby beach for fresh air and really amazing sunset views. I went to GRC 2023 with other members of Ohmori group (family), so had lots of fun in beach. Unfortunately, I cannot enjoy swimming because I am still taking beginner swimming lesson at Aeon Okazaki gym. I enjoyed lobster which is popular in that area, but, to be honest I really miss Japanese food during my 1 week stay in USA.

I want to thanks IMS, Sokendai and Moonshot funding agency for providing

me this opportunity to visit USA and explore the research work and also explore the island. I always follow one sanskrit quote “Karmanye vadhikaraste Ma Phaleshu Kadachana” – Perform your duty without attachment to outcome. I am thankful to Prof. Ohmori, Dr. Sylvain de Léséleuc, Dr. Takafumi Tomita and Dr. Yuki Torii Chew (Chew sama) for continuous and strong support.

“Acharya devo bhava” – Teacher is like a god

受賞者の声

Jaseela Palassery Ithikkal (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4年)

Award for Oral presentation at ICMSET conference 2023

I am Jaseela, a Ph.D student in Kera group at IMS. I am interested in optoelectronics. My journey in this field began during my master's studies, where I focused on organic solar cells under the guidance of Prof. Masahiro Hiramoto at IMS. Currently, I am exploring the fundamentals of solar cells by analyzing the photoelectron spectroscopy of organic semiconductors used in optoelectronics, under the guidance of Prof. Satoshi Kera. I specifically focused on the band dispersion features of PTCDI-C8, a well-known n-type semiconductor.

I am very grateful for the opportunity to present the results

of my study at the International Conference on Material Science, Engineering and Technology (ICMSET) held in Singapore. The title of my oral presentation was “A Charge Transport Mechanism in Organic Semiconductor: a PTCDI-C8 Thin Film”. This conference provided a valuable platform to showcase my research in front of esteemed scholars from around the world. The recognition of my work with an award further strengthened my confidence. This award not only serves as a personal achievement but also reflects the significance of the research in the field. This recognition motivates me to continue



contributing to the advancement of optoelectronics.

I would like to express my sincere gratitude to Prof. Satoshi Kera and Assistant Prof. Keisuke Fukutani for their continuous support and fruitful discussions. I am also grateful to IMS for supporting students in attending conferences, enabling exposure and facilitating significant progress in their careers.

E V E N T R E P O R T

総研大アジア冬の学校2023

担当教員 2023年度担当教員

総合研究大学院大学 先端学術院 分子科学コース 准教授 熊谷 崇

総研大「アジア冬の学校2023」を2024年1月10日（水）に分子研で開催しました。このイベントは、分子研が行う研究及び教育活動をアジア諸国の大学や研究機関に紹介する目的で2004年度にスタートしました。分子研アジア国際インターナショナルプログラム（IIPA）に参加している学生や研究者が中心となり、普段とは異なる研究（や文化）の交流を促しています。例年講演会が行われていますが、今回は分子研の奥村准教授、タイの連携校であるチュラロンコン大学のKittikhunnatham Preecha博士とNarupai Benjaporn博士を招き、生体分子の理論研究と金属有機構造体の実験研究に関する最新の知見が披露されました。どの講演も研究への情熱が伝わる素晴らしい内容でした。海外からの講師招聘はアジア冬の学校創設以来の初の試みで、休憩時間も含め、活発なディスカッショ

ンが行われました。総研大生を含む若手研究者のポスターセッションも盛況で、終了時刻まで熱心な議論が続けられました。今後もアジアを軸にした国際的な学術交流の場として、アジア冬の学校の更なる発展を期待

しています。このイベントの成功に貢献してくださったすべての関係者、特に戦略室の永園さんと太刀川さんに、心からの感謝を申し上げます。



2023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
構造分子科学	Ruttapol MALATONG	Development of Switchable Spin Selectivity Based on Controllable Organic Chirality	理学	2023.9.28
	Adrian Joe Urban	Towards Benchmarking Chirality-Induced Spin Selectivity: The Case of Chiral Tetrapyrroles	理学	2023.9.28
	相澤 洋紀	磁性基板による Co(II) フタロシアニン螺旋超分子のキラル分割について	理学	2023.9.28

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137回	2023年10月20日	パズルのように分子を作る ～曲がった炭素分子の有機合成～	瀬川 泰知 (分子科学研究所 准教授)
第138回	2023年12月15日	光格子時計が拓く新たな時間計測	香取 秀俊 (東京大学 教授)

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第971回	2023年9月20日	"What is Life?" Can we Measure it?	Prof. R. J. Dwayne Miller (Departments of Chemistry and Physics, University of Toronto, Canada)
第972回	2023年9月21日	Optical cycling of arenes for single-molecule quantum state preparation and readout	Prof. Wesley C. Campbell (University of California, Los Angeles)
第973回	2023年11月10日	時間分解走査プローブ顕微鏡法とナノ科学 Time-resolved scanning probe microscopy and nanoscience	重川 秀実 (筑波大学 数理物質系 教授)
第974回	2023年12月11日	Putting Molecular Clusters to Work in Analytical Chemistry: Quantitative Chiral Analysis using the Chiral Tag Method	Prof. Brooks H. Pate (University of Virginia)
第975回	2024年1月15日	Helical Aromatics in Flatland: Magneto-Chiral Selectivity, Electron Spin-Filtering, Kondo Physics and Molecular Motoring on Surfaces	Prof. Karl-Heinz Ernst (University of Zurich)
第976回	2024年1月23日	大気からの直接的 CO ₂ 回収を実現する分離ナノ膜の創製と分離膜高度化に向けた分子設計	藤川 茂紀 (九州大学 カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所教授)

■人事異動(2023年6月2日～2023年11月1日)

異動年月日	氏名	区分	異動後の所属・職名	現(旧)の所属・職名	備考
2023/ 6/16	山 岸 芽 衣	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		
2023/ 6/30	角 谷 利 恵	在籍出向 受入終了	東芝エネルギーシステムズ株式会社	社会連携研究部門 特任専門員	
2023/ 6/30	市 井 智 章	辞職		物質分子科学研究領域電子構造研究部門 特任助教 (分子科学研究所特別研究員)	
2023/ 7/ 1	白男川 貴 史	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	日本学術振興会 特別研究員 (PD)	
2023/ 7/ 1	BRUNETEAU, Baptiste Valentin	採用	社会連携研究部門 特任研究員		
2023/ 7/ 1	角 谷 利 恵	採用	社会連携研究部門 特任専門員	東芝エネルギーシステムズ株式会社	
2023/ 7/ 1	笠 原 裕 子	採用	生命創成探究センター創成研究領域 事務支援員		
2023/ 7/ 1	白男川 貴 史	勤務 命令	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)	
2023/ 7/ 1	片 柳 英 樹	配置換	極端紫外光研究施設 助手	研究力強化戦略室 助手	
2023/ 7/ 1	横 田 光 代	所属 変更	極端紫外光研究施設 事務支援員	研究力強化戦略室 事務支援員	
2023/ 7/31	松 岡 亮 太	辞職	大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻 助教	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 助教	
2023/ 8/ 1	田 村 光	採用	光分子科学研究領域光分子科学第二研究部門 特任助教	米国: Purdue University Postdoctoral Research Fellow	
2023/ 8/16	前 島 尚 行	採用	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 特任助教	立教大学理学部化学科 助教	
2023/ 8/31	壬 生 託 人	辞職	大阪大学基礎工学研究科物質創成専攻 未来物質領域 特任研究員	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 特任専門員	

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
2023/ 9/ 1	JAUNET USAGE JAUNET-LAHARY, Titouan Teddy	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	フランス：Nantes University Lecturer (ATER) / Researcher	
2023/ 9/ 1	野村潤子	採用	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 事務支援員		
2023/ 9/30	斎藤晃	辞職	分子科学研究所物質分子科学研究領域電子構造研究部門 若手研究者雇用特別研究員	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 研究員	
2023/ 9/30	高橋翔太	辞職	分子科学研究所物質分子科学研究領域電子構造研究部門 若手研究者雇用特別研究員	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 研究員	
2023/ 9/30	岡田知	退職		生命創成探究センター創成研究領域事務支援員	
2023/ 9/30	草本哲郎	兼任終了	(大阪大学大学院基礎工学研究科教授)	生命・錯体分子科学研究領域錯体物性研究部門 教授(兼任)	
2023/ 9/30	古賀信康	兼任終了	(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)	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 教授(兼任)	
2023/10/ 1	堀内滉太	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 助教	関西学院大学大学院 研究員	
2023/10/ 1	下ヶ橋龍之介	採用	光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 特任助教		
2023/10/ 1	WANG, Yu	採用	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 特任研究員		
2023/10/ 1	斎藤晃	採用	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 若手研究者雇用特別研究員	日本学術振興会 特別研究員	
2023/10/ 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 若手研究者雇用特別研究員	日本学術振興会 特別研究員	
2023/10/ 1	伊神賢人	採用	研究力強化戦略室(自然科学研究機構 事務局) 特任専門員	株式会社 日本経済新聞社ビジネス報道部門 記者	
2023/10/ 1	小林稜平	採用	計算科学研究センター 若手研究者雇用特別研究員	日本学術振興会 特別研究員	
2023/10/ 1	東田怜	採用	生命創成探究センター創成研究領域若手研究者雇用特別研究員	日本学術振興会 特別研究員	
2023/10/ 1	谷本勝一	採用	生命創成探究センター創成研究領域若手研究者雇用特別研究員	日本学術振興会 特別研究員	
2023/10/ 1	西岡雪奈	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		
2023/10/ 1	村田了介	採用	協奏分子システム研究センター機能分子システム創成研究部門 技術支援員		
2023/10/31	大國泰子	退職		生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 技術支援員	
2023/10/31	中根香織	辞職		生命創成探究センター創成研究領域事務支援員	
2023/11/ 1	尾上康宏	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 特任研究員	立命館大学生命科学部生命情報学助教	
2023/11/ 1	中村敏和	配置換, 名称付与	研究力強化戦略室 特任研究員(特任部長(研究戦略担当))	機器センター 特任研究員	
2023/11/ 1	清水智樹	採用	生命創成探究センター研究戦略室 特任准教授	京都大学高等研究院ヒト生物学高等研究拠点(WPI-ASHBi) 特定講師	
2023/11/ 1	清水智樹	併任	生命・錯体分子科学研究領域生体分子機能研究部門 特任准教授	(生命創成探究センター研究戦略室 特任准教授)	

編集後記

分子研レターズの本号の発行にあたり、まずは御執筆頂いた著者の方々、出版のご協力を頂いた方々に厚く御礼を申し上げます。

分子研レターズは、広範な研究対象を持つ分子科学のコミュニティのための情報誌として、重要な役割を果たしていると思います。分子科学会や本号でもご紹介頂いた日本表面真空学会などの多くの学会で、分子研出身者が指導的な立場でご活躍されていると感じます。そのため、分子研レターズは、分子研現職員だけでなく、分子研出身者、分子研で共同利用を実施する研究者の方々などの情報共有の場として、とても有意義なものだと思います。本号でも、多くの方々に魅力ある記事を書いて頂き、とても充実した内容になりました。

特に、本号ではUVSOR40周年、日本での放射光研究60周年など、UVSOR関連の記事が多数あります。UVSORは分子研創設の初期の段階から稼働していて、2度のアップグレードにより、世界最先端の光源性能を有しています。また、UVSOR独自の技術開発を多数行うことで、多くの共同利用研究者を受け入れると共に、多くの人材育成を行ってきたと思います。UVSORの次期計画の議論も進んでいます。UVSOR関連の記事を読んで頂いて、ご興味がありましたら、是非UVSORの共同利用を実施して頂くと共に、UVSORの次期計画へのご支援を頂けると幸いです。

今後も魅力ある分子研レターズが発行できるように編集委員一同努力していきますので、皆様方のご指導、ご協力を頂きますよう、何卒よろしくお願ひ申し上げます。

編集担当 長坂 将成

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. 89

分子研レターズ

発行日 2024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 松井文彦 (委員長)
長坂将成 (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
西村勝之
古池美彦
山本浩史
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。

