

COLUMN



Research presentation at Biophysical Society 2026 annual meeting ——学会参加について

関 健仁

総合研究大学院大学 先端学術専攻 分子科学コース 博士後期課程3年（当時*）
* 2026年6月に総研大博士後期課程を修了し、現在は理化学研究所 特別研究員に就任。

せき・たけひと

2023年4月に総合研究大学院大学・博士後期課程へ入学。自然科学研究機構・計算科学研究センター・岡崎グループにて、細菌がもつ呼吸鎖酵素（レドックス駆動ナトリウムポンプ）の分子シミュレーションを行い、その分子メカニズムの解明と制御分子の設計に取り組んでいる。写真は、アメリカ生物物理学会年会の帰りに立ち寄ったUCバークレーで撮影（青い鞆を持っているのが筆者）。

2026年2月21日から25日にかけて、米国サンフランシスコで開催されたアメリカ生物物理学会年会へ参加しました。本学会では、私たちの最近の研究成果である、AlphaFold、分子動力学シミュレーション、マルコフ状態モデリングを組み合わせたレドックス駆動ナトリウムポンプの機能解明について発表を行いました。学会初日にはサブグループ Channels, Receptors & Transporters に参加し、翌日以降は分子シミュレーションや生体分子モデリ

ングのセッションを中心に聴講しました。国内学会とは異なる規模の大きさや、力強く自信を持って発表する演者の姿に大きな刺激を受けました。特に、AIを用いた蛋白質構造モデリング、マルコフ状態モデルによる蛋白質-制御分子複合体の構造ダイナミクス解析、さらにシミュレーション結果を実験的に検証する研究は印象深く、自身の研究の位置づけを再認識するとともに、今後の研究方針を考える上で大変参考になりました。また、学会期間中にはサ

ンフランシスコ市内やUCバークレー校を訪れる機会もあり、自動運転タクシーの体験や、世界的な研究大学の雰囲気に触れることができました。

本学会への参加は、国際的かつ大規模な場で研究発表を行う機会となっただけでなく、関連分野の最新動向を直接知る非常に有意義な経験となりました。このような貴重な機会を与えて下さり、経済的にもご支援下さった岡崎圭一先生に深謝申し上げます。



NMR測定に関する技術習得

寺島 悠人

総合研究大学院大学 先端学術専攻 分子科学コース 博士後期課程3年

てらしま・ゆうと

2024年3月、名古屋工業大学 工学部 生命・応用化学科 卒。2024年4月より榎山グループにてハレニウム錯体触媒について研究している。最近好きな言葉は、トルストイの「If you want to be happy, be.」。毎朝、「今日はどんなことが起きるんだろう」という可能性に胸を膨らませて家の扉を開けている。

私は2026年2月、SOKENDAI研究派遣プログラムを通じて、ウプサラ大学 Máté Erdélyi教授の研究室にてNMR測定に関する技術を習得しました。

我々はこれまでに、新たな分子性触媒として、ハレニウム錯体触媒を開発してきました。本触媒は、一価ハロゲン X^+ （ $X = \text{Br}, \text{I}$ ）、ビスピリジル配位

子、対アニオン Y から構成され、 $[N \cdots X \cdots N] Y$ と表記されます。ここで X^+ はビスピリジル配位子の窒素原子と「三中心四電子ハロゲン結合」を形成しています。これまで二中心ハロゲン結合を利用した触媒設計例は存在しましたが、三中心四電子ハロゲン結合を組み込んだ例は我々が初めてです。ビ

スピリジル配位子は有機合成化学的な分子修飾が可能であり、分子修飾による触媒活性の向上が期待できます。また、対アニオンも触媒活性に大きく影響し、無機分子に加えて有機分子を対象アニオンに用いた錯体も調製できることを明らかにしました。現在、ビスピリジル配位子および有機対アニオン「ス

ルホンイミデート」から構成される $[N \cdots X \cdots N] Y$ の改良を進めています。具体的には、配位子および対アニオンに電子求引基または電子供与基を導入した $[N \cdots X \cdots N] Y$ のライブラリを合成し、それらの収率データおよび触媒構造に基づくパラメータを用いて、機械学習により最適な置換基を探索しています。

本派遣では、NMR測定法である ^{15}N HMBCおよびDOSY、IPEに関する測定技術を習得しました。測定対象とした化合物は、ビスピリジル配位子および有機対アニオン「スルホンイミデート」から構成される $[N \cdots I \cdots N] Y$ です。

^{15}N HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation)は、 ^1H と ^{15}N の間の2あるいは3結合を介したスピン結合を検出するNMR測定法であり、窒素原子周辺の分子骨格の決定に活用されます。 ^{15}N は天然存在比が低いため、直接 ^{15}N -NMRピークを測定するためには長時間の測定を要する上に、検出感度が低いという問題が存在します。そこで ^{15}N HMBCでは、 ^1H を介して ^{15}N を検出することにより、短時間で高感度な測定が可能となります。今回、 ^{15}N HMBCにより、ビスピリジル配位子単体の ^{15}N -NMR

ピーク値および、 $[N \cdots I \cdots N] Y$ 中のビスピリジル配位子の ^{15}N -NMRピーク値を測定しました(図1)。これら2ピークの値が異なることから、三中心四電子ハロゲン結合が形成されていることが示唆されます。また、ピリジン環4位に置換基を導入したビスピリジル配位子単体の ^{15}N -NMRピーク値も同様に測定したところ、導入した置換基の電子供与性の変化に伴い、ピーク値も変化しました。この結果は、置換基の変化が、ピリジン環内の電子状態変化に影響を及ぼしていることの確認となりました。今後、ビスピリジル配位子および対アニオンそれぞれに電子求引基または電子供与基を導入した $[N \cdots X \cdots N] Y$ について ^{15}N HMBC測定を実施して ^{15}N -NMRピーク値を入手します。そして、機械学習におけるパラメータとしてピーク値を利用し、最適置換基を探索する予定です。

DOSY (Diffusion Ordered Spectroscopy)は、パルス磁場勾配を利用して分子の拡散運動を観測するNMR測定法です。分子は、大きいほど拡散が遅くなり、小さいほど拡散が速くなるため、混合物試料の複雑なスペクトルを分子毎に分離することが可能です。分子毎の拡散速度を示す比例定数は拡散定数と定義され、DOSY測定

により算出されます。今回、ビスピリジル配位子単体および $[N \cdots I \cdots N] Y$ についてDOSY測定を実施したところ、単一化合物のピークがそれぞれ観測されました(図2)。この結果は、測定試料に不純物が混在していないことの確認となりました。また、 $[N \cdots I \cdots N]^+$ および対アニオン Y の拡散係数は等しい値を示したことから、錯体が強固なイオン結合で形成されていることが示唆されます。今後、ビスピリジル配位子および対アニオンそれぞれに分子修飾を施した $[N \cdots X \cdots N] Y$ についてDOSY測定を実施し、その結果から、純度を確認すると共に、錯体毎の拡散係数の差異について調査する予定です。

IPE (Isotopic Perturbation of Equilibrium) 測定は、測定試料において観測される同位体効果をもとに、分子内の平衡状態について分析する手法です。NMR測定において単一のピークとして現れる速い平衡について、同位体標識によりピークをわずかに変化させることで、平衡状態が動的であるか、静的であるかといった知見を得ることが可能です。今回、ビスピリジル配位子単体および $[N \cdots I \cdots N] Y$ についてIPE測定を実施しました(図3)。ピリジン環 α 位を重水素化したビスピリジル配位子を使用して、複数の

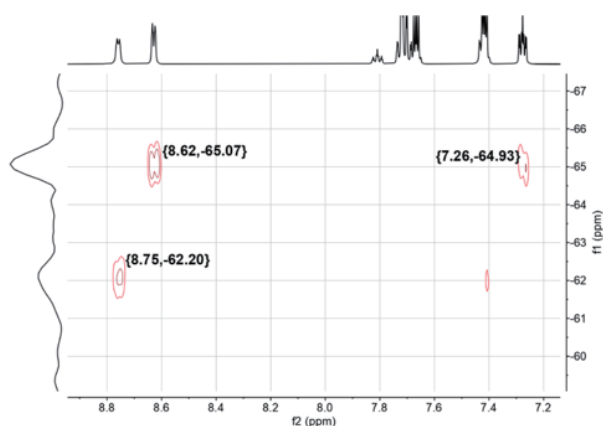


図1 ビスピリジル配位子単体の ^{15}N HMBC スペクトル



図2 $[N \cdots I \cdots N] Y$ のDOSY スペクトル

測定温度での ^{13}C $\{^1\text{H}, ^2\text{H}\}$ -NMR測定における同位体効果を観測することで、一価ヨウ素および I^+ ビスピリジル配位子の間に三中心四電子ハロゲン結合が形成されていることを確認しました。今後、配位子および対アニオンそれぞれに種々の置換基を導入した $[\text{N} \cdots \text{X} \cdots \text{N}]^+\text{Y}^-$ についてIPE測定を実施し、所望の結合が形成されているか確認する予定です。

おわりに、NMR測定に関してご指導いただいたMáté Erdélyi教授の研究室の皆様に感謝いたします。NMR測定を専門とする研究者から説明を受けることで、繊細な心で測定・分析に向き合う姿勢の重要性を再確認しました。また、実験操作に関して議論する中で、

自分の意見を尊重しつつ、柔軟に他者の意見を受け入れることの重要性をも再確認しました。今後は、習得した測

定技術を駆使し、研究遂行に務めて参ります。

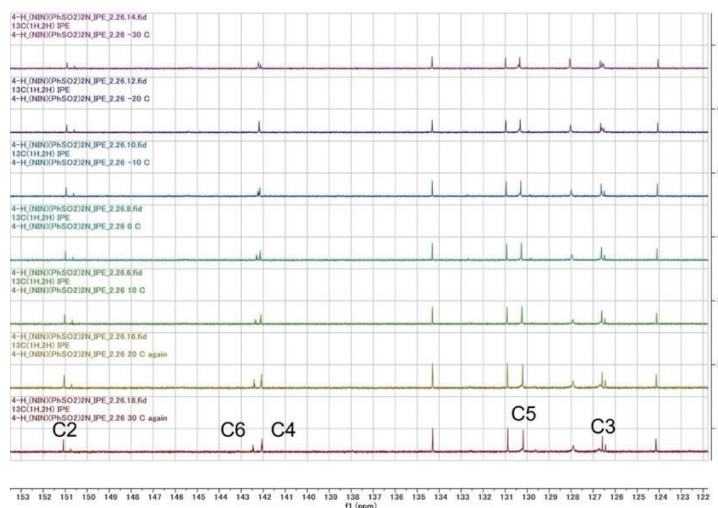


図3 $[\text{N} \cdots \text{I} \cdots \text{N}]^+\text{Y}^-$ の ^{13}C $\{^1\text{H}, ^2\text{H}\}$ -NMRスペクトル

ウィーン工科大学研究室訪問について

吉澤 龍／金 成翔

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

(よしざわ・りゅう：右から一人目) 杉本グループにて超短パルスレーザーを用いた新奇非線形分光手法を用いた非晶質構造解析法の開発および固固界面への展開に取り組んでいます。

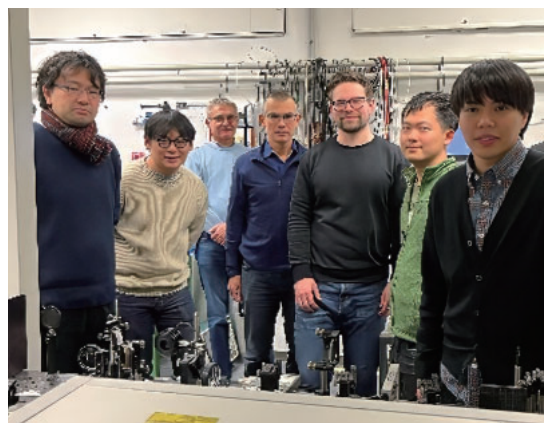
(きん・せいしょう：左から二人目) 同じく杉本グループにて、超短パルスレーザーを用いた新奇界面分光手法の開発とその電気化学界面への展開に取り組んでいます。

写真は、Baltuška研究室の実験室にて皆様と撮影したものです。

2025年11月15日から23日にかけて、オーストリアにあるウィーン工科大学フォトンクス研究所 (Prof. Baltuška研究室) を訪問しました。今回の訪問では、我々の研究テーマである界面コヒーレントラマン分光の高度化に有用な光技術を集中的に学ぶことを目的としました。研究室見学では、超短パルスレーザー光の発生や波長変換技術、および真空チャンバーと組み合わせた光学実験系などを見学し、非線形結晶やビームの配置、ビーム品質の評価、バーストモード発振の原理と計測手法といった、論文からだけでは分かりにくい実践的なノウハウ

を具体的に学ぶことができました。また、我々の研究内容についてセミナー形式で発表を行い、Baltuška先生をはじめ研究室メンバーの方々から、多くの質問をいただき物理化学的な議論を深めることができました。

11月後半の滞在でしたが、ウィーンの街はすでにクリスマスの彩りに包まれ、あちこちでクリスマスマーケットが賑わいを見せていました。伝統的な宮殿や大聖堂を前に、凍えるような寒さの中で冷えた体を温めてくれるホットワインの味は格別でした。また、かの有名なウィーン国立歌劇場でオペラ



を鑑賞し、生の歌声とオーケストラの迫力に圧倒されながらも、言語の壁を越えて伝わる表現の力に深い感動を覚えました。

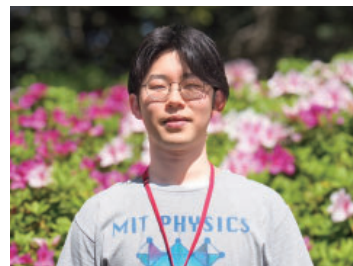
今回得られた光学技術や計測に関する知見を踏まえて我々のコヒーレントラマン分光計測をさらに高度化していく予定です。最後に、本訪問を温かく受け入れてくださった Baltuška先生および研究室の皆様に、心より感謝申し上げます。

APS March Meetingでの研究発表、研究室訪問

新川 聖也 総合研究大学院大学 先端学術専攻 分子科学コース 博士前期課程2年

しんかわ・せいや

2025年より分子科学研究所・大森グループ修士課程に在籍。横浜国立大学で物理学を専攻。現在は、中性原子型量子コンピュータの実現に向け、 ^{87}Rb 原子のD2遷移を用いた単一原子の光制御・冷却・高精度読み出しの研究に取り組んでいます。2021年にMIT、2026年にJILAで研究滞在を行いました。



私は、コロラド州デンバーで開催されたAPS March Meetingに参加し、ポスター発表を行いました。APS March Meetingはアメリカ物理学会が主催する大規模な国際会議で、日本物理学会に近い位置づけでありながら、専門分野ごとの密度は想像以上でした。会場では多数のセッションが並行して開催されていました。どの発表を聞きに行くかを選ぶこと自体が難しいほどで、自分の研究分野に近い話題を一日中聞くことができる環境がありました。

ポスター発表では、私が所属する大森グループの量子コンピュータ研究について紹介し、その中でも特に、レーザー光で捕まえた単一原子の状態を、原子を失わずに高い精度で読み出す手法について発表しました。大森グループでは、原子を一つずつ量子ビット、すなわち量子情報を担う最小単位として使う中性原子型量子コンピュータの研究を進めています。この方式では、一つ一つの原子の状態を正確に読み出す必要があります。一方で、読み出しのために光を当てると、原子が加熱されたり、捕獲場所から失われたりすることがあります。今回のポスターでは、原子をなるべく失わずに状態を判別するために、どのような実験的工夫を行ったのかを中心に議論しました。

ポスターには、量子コンピュータを研究しているグループの学生や研究者が多く来てくれました。分野内の人からは、具体的にどのような方法を使ったのか、どの技術的要素が性能向上に寄与しているのか、今後さらに性能を上げるには何が制限になるのかといった質問を受けま

した。特に印象に残っているのは、同じような先行研究に取り組んでいるグループの研究者から、「この研究はこれからどこに向かうのか」と聞かれたことでした。自分が今後やりたいことを話すと、それに対して具体的な技術的課題や研究の方向性について深く議論できました。

分野外の研究者からは、原子を使った量子コンピュータがどのように動作するのか、なぜ原子を一つずつ並べて制御するのか、といった基礎的な質問も受けました。普段は近い分野の人と話すことが多いため、前提を共有しているつもりで説明してしまいます。しかし、分野外の人に説明する際には、なぜ単一原子を量子ビットとして使うのか、なぜ原子の状態を正確に読み出すことが量子コンピュータ全体の性能に直結するのかを、背景から説明する必要がありました。ポスター発表で最も面白かったのは、発表内容を一方的に説明することではなく、ポスターをきっかけに会話が始まることでした。どのような研究グループの人が自分の研究に興味を持つのかを直接知ることができ、自分の研究の見え方を確認する機会になりました。

学会では、大学や研究機関による発表だけでなく、Google Quantum AIをはじめとする企業による研究紹介も行われていました。量子コンピュータ研究は、基礎科学の延長であると同時に、すでに大規模な技術開発の段階に入っていました。また、学会後の夜には量子技術関連の企業が研究者向けのレセプションを開いており、学生、ポスドク、教員、企業研究者が近い距離で交流していました。

有名な研究室同士がホッケーゲームで対決するイベントもあり、日本の学会ではあまり見ない、分野全体が一つのコミュニティとして動いているような雰囲気がありました。

APS March Meetingの後、私はコロラド州ボルダーにあるJILAのRegal Groupに約1か月間滞在しました。JILAはコロラド大学ボルダー校とNISTの共同研究機関であり、原子・分子・光を扱う研究分野において世界的に高い存在感を持つ研究機関です。今回の滞在中では、トップレベルの研究機関で研究者たちがどのように研究に取り組み、どのように議論し、どのような生活を送りながら研究を続けているのかを知りたいと考えていました。また、博士課程修了後に自分がどのような環境で研究をしたいのかを考える機会でもありました。

滞在中は、レーザー光で捕まえた複数の原子を冷却するためのレーザーシステムの開発に取り組みました。この実験では、冷却に用いる光が原子同士の衝突を誘起し、原子が失われる場合があります。そのため、光支援衝突を避けながら原子の運動を冷やすためのレーザーシステムを扱いました。この作業を通して、装置開発における細かな制約をどのように整理し、研究の目的に結びつけて議論するのかを間近で見ることができました。

Regal Groupで特に印象的だったのは、一つの研究テーマに対して非常に深く議論し、さらにそれをどのように表現すればよいかまで丁寧に考えていたことでした。単に実験結果を得るだけではなく、その研究が分野の中でどこに位置付

けられるのか、どのような言葉で説明すればターゲットとする読者や聴衆に伝わるのかを、時間をかけて議論していました。外から自分たちの研究がどう見えるのかを意識しながら、研究の意義を組み立てていく姿勢は非常に参考になりました。

JILAで強く印象に残ったのは、原子・分子・光を扱う研究コミュニティの大きさでした。昼食の時間には、複数の研究グループの学生やポスドクが自然に集まり、研究の進捗や分野内のニュースについて話していました。もうすぐ論文を出すという話や、Google Quantum AIによる中性原子型量子コンピュータ研究への参入も、日常的な会話の中で話題になっていました。JILAには近い分野の

研究グループが多く集まっており、研究テーマが異なっても共通の言葉で議論できる環境がありました。実験で必要な物を別のグループに借りに行くことも自然に行われており、独立した研究室が並んでいるというよりも、大きな研究コミュニティの中で研究しているような連帯感がありました。

ボルダーでの生活も印象深いものでした。私はAirbnbでコリビング（共同生活）形式の家に滞在し、家の人たちと食事をしたり、子どもの誕生日会や週末のフットボール観戦に参加したりしながら過ごしました。研究者の働き方も人それぞれで、長時間研究室で過ごす人もいれば、決まった時間で仕事を切り上げる人もいました。以前に海外に滞在した際に

は、文化や生活環境に慣れることが難しく、刺激を受ける一方で精神的にきつい部分もありました。しかし今回は、大森グループで日頃から国際的な研究環境に触れていたこともあり、研究面でも生活面でも自然に楽しむことができました。

今回のAPS March MeetingとJILA滞在を通して、世界の研究者を以前より身近に感じられるようになりました。海外で研究を続けることも、自分にとって遠い選択肢ではなく、現実的な進路の一つになりました。また、研究内容だけでなく、どのような環境で、どのような人たちと議論しながら研究を進めたいのかを考える機会にもなりました。

Les houches (France)にてワークショップへの参加と Tübingen (Germany)での短期研究滞在

小田川 陽陸 総合研究大学院大学 先端学術専攻 分子科学コース 博士前期課程2年

おだかわ・はるむ

2025年4月より大森グループに所属し、量子コンピュータチームの一員として中性原子方式量子コンピュータの開発に従事しています。個人研究では、高精度な原子制御を実現するための原子冷却技術、高精度な初期状態の生成、ならびにそれらの実現に不可欠な安定かつ高出力なレーザー光源の開発を主なテーマとしています。

私は今春、フランスのLes Houchesで開催された“Workshop on Long-range Ultracold Interactions 2026”に参加する機会をいただきました。

このワークショップは、長距離相互作用を特徴とする量子系に関する研究者および学生が、実験・理論の垣根を越えて集うものです。本ワークショップは、フランス国立科学研究センター（CNRS）の研究ディレクターであり、フランス光学研究所（Institut d'Optique）内のCharles Fabry研究所のメンバーであるAntoine Browaeysによって企画されました。

対象とする物理系は中性原子、イオン、分子、磁性原子など多岐にわたり、

それぞれのプラットフォームにおける相互作用の制御や応用について活発な議論が行われました。会場はフランス・アルプスのモンブラン山麓に位置するLes Houchesの物理学スクールであり、5日間にわたって開催されました。このスクールは都市や大学から離れた環境であり、参加者が日常の研究活動から離れて

議論や共同研究に集中できるよう設計されています。また、フェルミやパウリといった著名な物理学者が講義を行った歴史を持ち、現代のサマースクールの原型ともいわれる場所です。

プログラムでは、計28件の45分講演と6件のチュートリアル講演が行われ、異なる量子系における基礎から最前



線まで幅広い内容が取り上げられました。さらに、毎晩1時間半にわたるポスターセッションが設けられ、参加者同士の密な議論の場となっていました。私は“Development of a Neutral-Atom Quantum Computer in Okazaki”という題目でポスター発表を行い、分子科学研究所・大森グループにおける中性原子量子コンピュータの研究方針、最新の成果、さらに自身のテーマであるレーザー光源開発について紹介しました。多くのポスドク研究員や博士後期課程の学生から具体的かつ本質的なコメントをいただき、自身の研究を多角的に見直す良い機会となりました。

また、本ワークショップは私にとって初めてのヨーロッパでの学術活動でもあり、主にヨーロッパ各地から集まった研究者との交流を通じて、新たな研究トピックに触れるとともに、自身がこれまで取り組んできた中性原子系以外の量子系の最新の発展についても理解を深めることができ、これまでの知見をさらに広げる機会となりました。

さらに、学術的側面にとどまらず、本ワークショップはフランス・アルプスに位置するLes Houchesで開催されたことも特徴的でした。スケジュールにはランチ後に約4時間半の休憩時間が設けられており、その時間を利用してスキーやスノーシューを楽しむことが主催者から推奨されていました。ディスカッションを通じて知り合った参加者とともにアクティビティを楽しんだり、そこからさらに新たな交流が生まれたり、研究面だけでなく人間的なつながりも深めることができました。フランス・アルプスの自然を満喫すると同時に、自身のキャリアや研究生活にとっても非常に有意義な時間を過ごすことができたと感じています。

このワークショップ参加後、私はさらに4週間、ドイツのチュービンゲン大学にてChristian Gross教授の研究グルー

プに滞在する機会をいただきました。この滞在は、中性原子量子コンピュータに関する日独間のASPIRE共同プログラムの一環として支援を受けたものです。

Gross研究室には、カリウム原子を用いた光ピンセットアレイ、極低温環境におけるストロンチウム原子の光ピンセットアレイ、リチウムとエルビウムの二種原子実験の3つのチームがあり、私は主にカリウム原子の実験チームに参加しました。滞在中は4週間の短期プロジェクトとして「外部共振器レーザーの組み立てと評価」に取り組みしました。加えて、日常的な実験やミーティングにも参加し、現在直面している課題や実験上の制約について相互に知識共有を行うことができました。

研究室全体の雰囲気は非常に温かく、特にストロンチウムのチームは、私が所属していないにもかかわらず、興味を持った内容についていつでもラボに来て学んでよいと快く受け入れてくれました。夜にはメンバー同士でパブにビールを飲みに行ったり、食事に出かけたりする機会も多く、チュービンゲンの美しい街並みと相まって、充実した時間を過ごすことができました。

また、Christian Gross教授は非常に魅力的な人物であり、ミーティングやランチの場においても常に熱意をもって楽しそうに議論を行う姿が印象的でした。滞在中、チュービンゲンから電車で約3時間の距離にあるダルムシュタット工科大学の研究室を見学したいと相談した際にも、強く後押ししていただきました。その結果、同大学において2つの研究室訪問に加え、45分間のセミナー講演を行う機会を得ることができました。日本語であっても45分間の口頭発表の機会は多くないため、非常に貴重な経験となりました。講演後には約1時間、コーヒーを交えながらカジュアルに研究について議論する時間も設けていただき、大変印

象深い経験となりました。

今回の滞在のきっかけとなったASPIREプログラムは5年間にわたるものであり、この機会に知り合ったドイツ側の学生たちと今後も継続的に連携していくことができると考えると、大変恵まれた環境にあると感じています。

改めて振り返ると、自身にとって初めてのヨーロッパ渡航であったにもかかわらず、この滞在は修士1年目の締めくくりとして、自分の立ち位置を見つめ直し、視野を広げるうえで非常に有意義なものでした。この経験を通して大きな自信を得るとともに、多くのことを学びました。

現在、自身が身を置く環境に対して強い感謝の気持ちを抱いています。1年前に入学した当初は英語でのコミュニケーションも十分ではありませんでしたが、英語を基本とするグループ環境の中で日常生活を送る中で、学術的な議論にも無理なく参加できるようになりました。博士前期課程1年目でありながら、このような国際的な滞在の機会を得られたことを大変ありがたく感じています。この滞在を提案してくださったSylvain准教授、日ごろからお世話になっております富田助教をはじめとした大森グループのメンバー、また本滞在の手続きをサポートしてくださったグループの秘書チームの皆様に深く感謝申し上げます。

