

分子研レターズ

VOL. **75**
March 2017
ISSN 0385-0560

●巻頭言

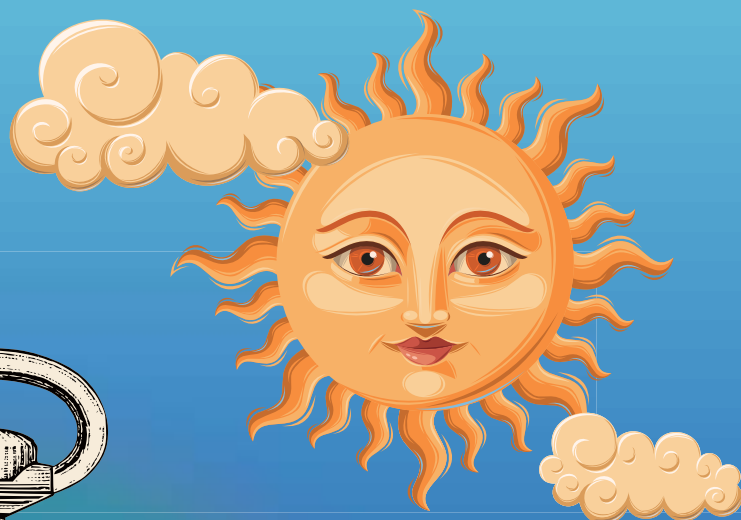
大学共同利用機関法人は 何処へ向かうのか

小森 彰夫 [自然科学研究機構 機構長]

●レターズ

分子研から学ぶこと、 期待すること

阿波賀 邦夫 [名古屋大学理学研究科 教授]



●分子科学の最先端

それでも時計の針は進む

秋山 修志 [協奏分子システム研究センター 教授]

X線小角散乱法による味覚受容体リガンド結合
ドメインの味物質結合に伴う構造変化の解析
山下 敦子 [岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 教授]

腸管出血性大腸菌感染症の治療薬開発のための
in silico研究

尾又 一実 [国立国際医療研究センター 数理疫学研究室室長]

共同利用研究ハイライト

異種金属一次元鎖錯体の常磁性化と磁化率測定
植村 一広 [岐阜大学工学部化学・生命工学科 准教授]

「第56回分子科学若手の会夏の学校
講義内容検討会」の開催報告

水野 雄太 [東京大学大学院総合文化研究科 博士課程2年]

巻頭言

01 大学共同利用機関法人は何処へ向かうのか

● 小森 彰夫 [自然科学研究機構・機構長]

レターズ

02 分子研から学ぶこと、期待すること ● 阿波賀 邦夫 [名古屋大学理学研究科・教授]

分子科学の最先端

04 それでも時計の針は進む

● 秋山 修志 [協奏分子システム研究センター・教授]

IMSニュース

8 主任研究員制度

9 受賞者の声——川合眞紀、石崎章仁

11 事業報告

12 国際研究協力事業報告

IMSカフェ

15 分子研出身者の今——田所 誠、鈴鹿 俊雅、澤井 仁美

20 分子研出身者の今 受賞報告——邨次 智

21 外国人研究職員の紹介——Prof. Amalendu Chandra

22 科研費、特別研究員等の審査の公正性を保つ仕組み——日本学術振興会学術システム研究センターの役割

24 伊藤光男元分子研所長の絵画葵丘常設展開設

25 コミュニティとコミュニケーション

26 新人自己紹介

アウトリーチ活動

20 第110回分子科学フォーラムを終えて

27 第48回国際化学オリンピックで金メダル

共同利用・共同研究

28 共同利用研究ハイライト

X線小角散乱法による味覚受容体リガンド結合ドメインの味物質結合に伴う構造変化の解析

山下 敦子 [岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 教授]

腸管出血性大腸菌感染症の治療薬開発のためのin silico研究

尾又 一実 [国立国際医療研究センター 数理疫学研究室室長]

異種金属一次元鎖錯体の常磁性化と磁化率測定

植村 一広 [岐阜大学工学部化学・生命工学科 准教授]

「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」の開催報告

水野 雄太 [東京大学大学院総合文化研究科 博士課程2年]

37 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

38 運営に関わって——大西 政義

39 関連学協会等との連携

42 分子研技術課

機器センターから装置開発室へ、異動して思うこと 中野 路子 [機器開発技術班]

大学院教育

45 イベントレポート

46 修了学生及び学位論文名

47 受賞者の声——橋谷田 俊、榎本 孝文

48 各種一覧

連載

19 覧古考新06

44 覧古考新07

大学共同利用機関法人は 何処へ向かうのか

小森 彰夫

自然科学研究機構 機構長



本年度の4月から、佐藤前機構長より引き継ぎを受け機構長に就任いたしました。どうぞ宜しくお願い申し上げます。分子研が研究成果において世界的に高い評価を得ていること、内部昇格を厳密に禁じていることなどは以前から存じております。今後、益々発展して頂きたいと願う次第ですが、改革が求められていることから、本機構の運営にも是非ご理解とご協力をお願い申し上げます。

本年度から第3期中期目標・計画期間が始まり、本機構も本格的に改革に取り組み始めています。現在、科学技術・学術審議会学術分科会研究環境基盤部会で「今後の共同利用・共同研究体制の在り方について」が審議されていることから、その結論に沿って改革を行う必要があります。これまでの審議状況から、結論には「異分野融合・新分野創生」「国際競争・国際協調」「産学連携」「大学の機能強化への貢献」の4項目が盛り込まれることは確実です。

異分野融合・新分野創生の項目では、学術研究の動向が多様に変化する中、学術研究の進展に合わせた柔軟な研究組織体制を迅速に構築できるようにする必要がありますのではないかと説明されています。この趣旨は、研究組織を変えなさいということであり、結論にも

盛り込まれるものと思われます。しかし、研究の進展に合わせて研究所を頻繁に創設・統廃合していくのは現実的ではありません。

大学共同利用機関の役割は大学と一体となって共同研究を行い、世界的学術成果を上げ続けること、また、それにより大学の研究・教育活動の一部を担うことと理解しています。最も重要な役割である共同研究は、これを実施するグループを作り必要な設備を整えれば実施できます。そもそも、本機構を構成する研究所は、組織の異なる大学の先生・院生と研究テーマ毎にグループを作って共同研究を進めてきています。

私は、機構を構成する研究所を変えることなく、異なる研究所・大学から、興味を持った、あるいは必要な先生・院生が「研究の進展に合わせて柔軟に」集まることによって、異分野融合研究を推進させることができると考えています。この異分野融合型研究で多くの成果が挙げられるようになれば、研究所・センターを新たに設立することなどによって新分野を確立させることが、即ち新分野創生を実現することができます。

上記の考えを基に、今、本機構では、研究所毎に共同研究を進めるのではなく、研究所の壁を取り払って機構

全体として実施する共同研究体制を構築しつつあります。どの分野にいても他分野との共同研究に自由に参加できる、そう言う異分野が融合し易い共同研究を始めたいと考えています。もちろん、従来通り分野毎の共同研究も実施することができます。

この新しい共同研究体制を本機構以外の3機構にも取り入れて頂ければ、4機構を構成する研究所全体と全国の大学が一丸となって、研究環境基盤部会で審議が進められている異分野融合・新分野創生の問題をクリアすることができます。また、世界に向かって展開することもできます。

誌面の関係で残りの3項目については言及できませんでしたが、また、機会がありましたらどこかで触れさせて頂きたいと思います。

こもり あきお

1978年東北大学大学院工学研究科博士後期課程修了。工学博士。オークリッジ国立研究所研究員、東北大学助手、九州大学助教授、核融合科学研究所助教授を経て、1997年核融合科学研究所教授、2009年～2015年自然科学研究機構核融合科学研究所長。2015年7月からプラズマ・核融合学会会長。16年4月から自然科学研究機構長。

阿波賀 邦夫 名古屋大学理学研究科 教授

分子研から学ぶこと、期待すること



あわが・くにお

名古屋大学理学研究科物質理学専攻教授。1988年、東京大学大学院博士課程単位取得退学。同年理学博士（東京大学）。同年、分子科学研究所助手。1992年東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻助教授をへて、2001年より名古屋大学理学研究科教授。2013-2016年には物質科学国際研究センター長。専門は物性化学。現在は、新しい作動原理に基づく有機エレクトロニクスに関心をもつ。

私が初めて分子研を訪問したのは、今から30年ほど前の博士課程在学中で、分子磁性関係の岡崎コンファレンスであったと思う。豊橋から何となくさみしい名鉄に乗り換えて、こんなところに有名な研究所があるのかと、車窓からぼんやり街並みを眺めた記憶がある。その当時は、国内で開催される国際研究集会など数少なく、論文でしか名前を知らなかった国内外の研究者の講演を聞いて、これがこの人かと感激した。その当時、学生だった私にすでに植え付けられていた分子研の印象は、恐ろしく優秀で国際的に知名度のある研究者が集い、切磋琢磨というよりバトルしている怖いところ、というものである。たしかに、当時の分子研の研究者、特に助手の方々にはオーラがついて見え、学会に行くとこれが〇〇さんであれが××さんと、学生間で噂したものである。その後何のご縁か、分子研極低温センター助手となり、自分の能力で本当にやっていけるのかと、着任後でさえ豊橋からの名鉄で岡崎に近づくときには、いつも漠然とした不安にさい

なまれたが、幸にして私の場合、当時の丸山有成センター長や技官の方たちの支えにより、自分の能力以上のものを引き出していただいたと思う。時は流れて今となり、岡崎の後、10年間の東京生活を経て、同じ愛知県の名古屋に移り住み、早いもので15年が経過した。近頃は、分子研を代表する活動としていくつかの研究を拝見する機会もあるが、分光学を中心に研究活動は相変わらず素晴らしく、十分に独創的で国際的な成果が上げられていると常々感心している。

最近、なんとなく耳にするのは、分子研の中を歩いても人に会わないという噂話である。これは、分子研のアクティビティを懸念する一部の意見の論拠というか、例え話になっている。これは山手地区ができて研究面積が増えたことや、あるいは所外の大規模実験施設で研究をされている研究者が増えたこともあろうが、ただ実際にも、教授および准教授の実員数は少し減少しているように見え、この噂話は、その実員数の減少を嘆く声にも聞こえる。しかし分子研の体制をよく見

ると、各研究グループにはほぼ2名の助教（特任を含む）ポストが配置され、また分子研の特長といえる技術課のサイズやアクティビティについては以前と何の変わりもないようである。つまり近年の予算削減のなかで、教授および准教授ポストを埋めない代わりに、研究経費そのものや若手研究者のポストを確保し、さらに研究支援組織のレベルを維持してきた、というのが分子研の現実であったのではないだろうか。これは結果論かもしれないが、分子研が歩んできた、研究グループの実数を抑制する一方、支援組織や若手研究者を充実させて個々のグループが研究にフルスイングできる環境を醸成し、高い研究成果を獲得し続けている事実は、多くの大学や研究機関にも大変参考になろう。近年、多くの大学では教授や准教授ポストを極力維持する一方、助教、技術者や事務員ポストを削減した。その結果、大学で生じていることは、事務員の半数は非常勤となり、技術の継承が難しくなる一方で、若手研究者がパーマネントな職に就く時期がおそくなり、また

シニア教員の方は会議にばかり出て忙しい忙しいと繰り返している（私のことです）。もちろん大学の場合、教育のノルマが重く、教員数の削減は簡単なことではないが、欧米の大学のような研究と教育の分業化は、少なくとも学部レベルで実行可能で、これによってより多くのエフォートを研究に割くことができるだろう。論文総数、トップ1%の論文数、博士号取得者数など、どの指標をとっても低下しつつある日本の研究アクティビティーにおいてV字回復の原動力となりうるのは、教員数の維持ではなく、研究支援の拡充と若手の登用以外にあり得ないと個人的には信じている。

教員数の抑制はともかくとして、支援グループの活性化は、諸外国の大学において既に顕在化している。筆者はエジンバラ大学の研究者と懇意にしているが、話の端々に出てくる研究・教育支援組織の充実ぶりに垂涎の念を抱いている。エジンバラ大学では、知財や産学連携、さらに産業界からの研究費獲得に関する研究者支援を、子会社（Edinburgh Research and Innovation: <http://www.research-innovation.ed.ac.uk/>）をつくって一元管理している。会社である以上、知財発掘や管理からの収益が重要視され、当然、支援もプロフェッショナルである。そして最も驚いたことは、この子会社から同大学化学科にでさえ2名の支援者が派遣されていることで、各研究者は、ティータイム？においてすべてのことを彼らとちょっと相談するだけで、それが支援組織全体に伝わって、必要なサービスを受けることができる。縦割りの日本の大学のシステムにおいては、知財であればこの窓口、産学連携でこの窓口と、研究者自身が窓口を探しだして話を上に

あげていくプロセスとは、スピード感やきめ細かさにおいて全く異なっている。役割分担が明確で、互いに役割を認めて分業するという文化が日本の大学にマッチするかやや心配だが、一人の研究者が小会社の社長のように振る舞わなければならない現状からすると、十分に考慮に値するシステムと言えよう。子供の数が半減しかねない厳しい少子化の現状を目の当たりして、教員数の減少は自然な成り行きと筆者は考えているが、それを研究支援サービスの向上、研究者一人当たりの研究費や研究面積の向上、若手支援などを実現することによって、研究者一人当たりの幸福度とアクティビティーを高めることに結びつけることが肝要と思う。

分子研に話を戻そう。冒頭に岡崎コンファレンスの思い出を記したが、もの珍しかったこのような国際研究集会は近年激増し、満足を乗り越えていささか食傷気味であることも事実である。岡コンの公募文案には、「通常の国際会議等で行われる研究発表ではなく、将来展望、研究の新展開の議論を主旨とする小規模な研究集会」を募集とある。この趣旨を守り、是非とも「他にない研究集会」を企画していただきたいと思う。研究会のお世話はそれなりに大変で、それゆえ所外から思い切った企画を出すことはなかなか難しだろう。やはりここは、分子研所員主導の戦略的な研究会を企画されてはいかがだろうか。身近な研究者で講演者を揃えるのではなく、分子科学の将来を見据えながら広い分野から講師招へいが望ましい。新しい研究情報に惹かれて岡崎に研究者が自然と集結すれば、これは分子研の若手研究者にとっても刺激的な場となるに違いない。分子科学のコミュ

ニティーの中心に立ち、研究情報と人材のハブ機能をさらに高めていただきたい。

私は、名古屋大学博士課程教育リーディングプログラム「グリーン自然科学国際教育研究プログラム」のコーディネーターを勤めている。分子研は本プログラムの連携研究所のひとつで、分子研の先生方には講義を毎年お願いし、名大院生のリトリート研究所研修の受け入れをお願いしている。分子研と我々の学生の“接触”を横目で眺める機会があるが、そんな時いつも思うのがマッチングの良さである。学生は、将来の就職先候補として研究所を意識し、研究所の方は将来の研究の担い手候補として学生を見る。一大学教員として分子研にお願いしたいのは、大学院生を取り合うライバルとしてではなく、学生の就職先としての分子研の役割である。具体的には、助教あるいは博士研究員としての雇用と、さらにはその先のキャリアパス形成支援である。現在あるいは将来において、若手研究者のすべてがアカデミックポジションに就くことは難しいことは自明で、それ以外のキャリアパスを開拓する必要がある。これは日本全体の課題で、分子研単独で行なえることでもないが、小回りが利き、また研究分野もある程度限定されている研究所の方が、このようなキャリアパス形成支援をきめ細かく実施できる可能性がある。どんな形であれ、分子研に就職できればその後の道が広く開かれているという状況をつくりだせれば、多くの優秀な人材を集めることができるだろう。大学→研究所という大まかな人材育成の流れの中で、さらに協働できれば幸いである。

末筆となりましたが、分子科学研究所の更なるご発展をお祈り申し上げます。



それでも時計の針は進む

秋山 修志 協奏分子システム研究センター 教授

あきやま・しゅうじ

1973年大阪府生まれ。2002年京都大学大学院工学研究科修了、博士（工学）。日本学術振興会特別研究員、理化学研究所基礎科学特別研究員、JST さきがけ研究員、名古屋大学大学院理学研究科講師／准教授を経て2012年4月より現職、および総合研究大学院大学・教授。2013年4月より協奏分子システム研究センター長。専門は時間生物学、生物物理学、放射光科学。

はじめに

古代ギリシアの哲学者アリストテレスの著書「自然学」には時間に関する次のような記述がある。

さて、それゆえに、われわれが「今」を、運動における前のと後のとしてもなく、あるいは同じ今だが前の今の或る〔終りの〕部分と後の今の或る〔初めの〕部分としてでもなしに、一つのものとして知覚する場合には、そこにはなんらの〔意識上の〕運動もないわけだから、なんらの時間も経過したとは思われない。これに反して、前と後を知覚する場合には、われわれはそこに時間があると言う。というのは、時間とはまさにこれ、すなわち、前と後に関しての運動の数であるから。

アリストテレス全集^{3[1]}より引用

運動の数をもって時間となすという捉え方である。鹿威し、日時計、クォーツ時計、そして原子時計——精度も種類も様々であるが、確かに古代より我々人類はこの考え方のもとで時間という概念を作り出し活用してきた経緯がある。本稿では、時を刻むタンパク質（直

径約10 nm）が存在していること、そしてそのタンパク質の構造や運動に地球の自転周期にあたる24時間の時定数書き込まれていることを紹介し、最後にこの分野の展望について述べたい。

生物（体内）時計

生物時計は次の3つの性質を備えている。

- ①恒常的条件において約24時間（概日）周期で発振する（自律的発振）。
- ②周期（周波数）が温度に依存しない（温度補償性）。
- ③環境変動に応じて振動の位相を変化させて同調することができる（同調能）。

図1は生物時計の基本骨格の概念図である。コアとなる振動体はそれ単独であっても概日周期で発振し（性質①）、その周期は温度に対して補償されている（性質②）。光や温度といった外界の周期的な変動が入力系を介して振動体へと伝わり、これによって振動体の位相が前後にシフトする（性質③）。振動体の位相は時刻情報として出力系を介して伝搬され、リズムミクな遺伝子発現を誘導する。これにより代謝や行動レベルで概日リズムが生じる。

リズムミクな現象を扱う際には何が本質であるかに常に注意を払う必要がある。周期的な反応であるため、ときに原因と結果を区別することが容易でないためである。また、リズムが観察されたときに、



図1 生物時計の基本骨格の概念図。図は文献（14）より改変。

それが出力を介したリズムであるのか（クォーツ時計の針）、それとも振動体（水晶の発振周期）を捉えているのか、単純なリズム観察から判定することはできない。振動の源（源振）を捉えているのであれば（図1）、入力系と出力系を取り除いた（隔絶された）状況でも振動は継続するはずである。

シアノバクテリアの生物時計の源振

シアノバクテリアの生物時計に関する研究は、その源振の所在を突き詰める方向に進展してきた。1998年に時計遺伝子（*kai*遺伝子）が同定され^[2]、その当時は、*kai*遺伝子発現のネガティブ・フィードバック制御の結果としてリズムが生成されるものと解釈された。これは転写時計と呼ばれるモデルであり、今日もシアノバクテリア以外の高等生物では主要な学説となっている。2005年、近藤らは*kai*遺伝子発現やその制御が源振ではなく、*kai*遺伝子をもとに作られた3種類のKaiタンパク質（KaiA、KaiB、KaiC）をアデノシン三リン酸（ATP）と試験管内で混合するだけで、安定な概日リズムが生じることを発見した（Kaiタンパク質時計）^[3]。我々は、その後の研究を通じて^[4-8]、KaiCが時計のコアであることを突き止めた。

KaiCは結合したATPをアデノシン二リン酸（ADP）とリン酸（Pi）に加水分解する機能（ATPase）を有する。図2に示すように、KaiAとKaiBが共存する環境では、加水分解の反応速度（ATPase活性）が24時間周期で自律的に発振する（ATPが存在する限り振動は何週間～月でも継続する）。KaiAとKaiBが存在しないとKaiCのATPase活性が安定に発振することは（今のところ）ないが、まったく発振しないというわけでもないことに我々は気が付い

た^[7]。図2が示すように、KaiC単独であってもATPase活性は減衰振動を示し、制御工学に基づいた解析（2次の伝達関数を仮定）を行ったところ減衰振動成分が 0.91 d^{-1} の固有振動数（ ω ）を有することがわかった。これは地球の自転とほぼ同じ頻度（1回/日）で運動する“何か”がタンパク質分子であるKaiCに内包されていることを示している。KaiAとKaiBとKaiCが共存すると自律的かつ安定的に発振、しかしKaiAとKaiBのみでは減衰型の振動さえ示さない——これらのことを考慮すると、KaiCこそが源振であり、そこにエンコードされている ω がシアノバクテリアの生物時計の針を進める速度を決定する因子であるといえよう。

ATPaseと ω と構造の関係

興味深いことに、 ω の値にはKaiCのATPase活性（N末端ドメイン）と高い相関が見られた^[7]——アミノ酸変異によってKaiC単独でのATPase活性が2倍に向上すると、 ω （図3C）や転

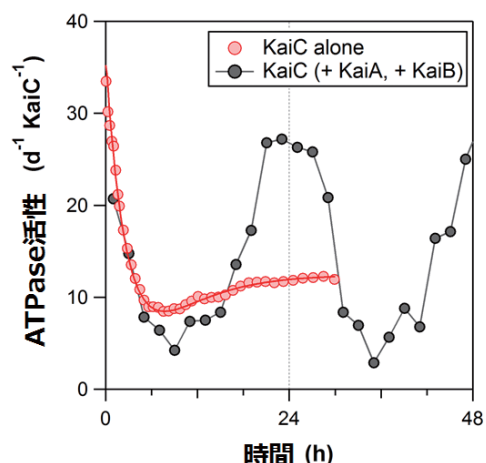


図2 リズミックなKaiCのATPase活性。図は文献(7)より改変。

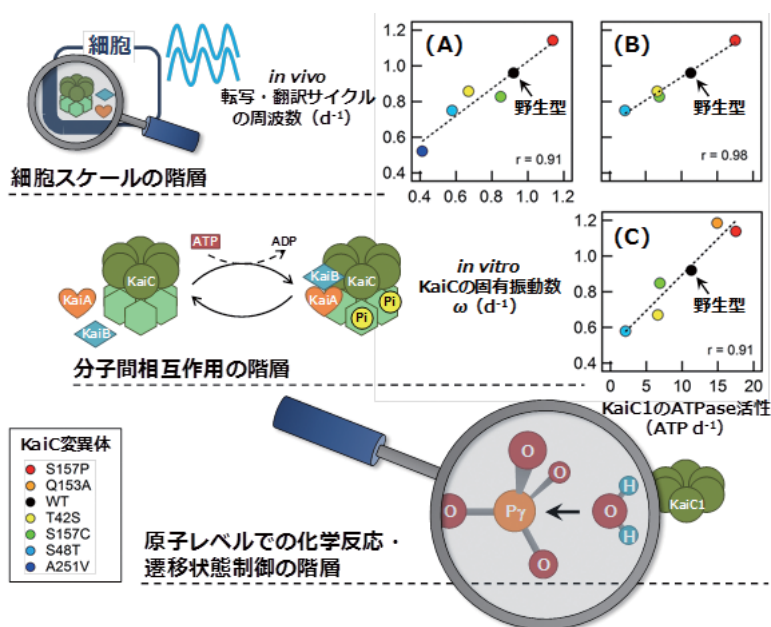


図3 シアノバクテリア概日時計システムの貫階層性。(A)転写時計の周波数とKaiCの ω の相関プロット。(B)転写時計の周波数とKaiCのATPase活性の相関プロット。(C)KaiCの ω とATPase活性の相関プロット。※遺伝子組換え技術を用いて、KaiCの狙った場所にアミノ酸変異を導入し、その変異型タンパク質を細胞内で発現させることができる。変異の導入箇所によってシアノバクテリアの生物時計システムの周期が短くなったり（短周期型変異）、長くなったりする（長周期型変異）。KaiC変異体を精製して試験管内で ω を実測してみると、細胞（転写時計）のリズムの振動数と良い一致が見られた（パネルA）。図は文献(7)より改変。

写時計の振動数（図3B）も2倍になる。KaiCのATPase活性（ 12 d^{-1} ）は、よく知られているモータータンパク質（ $10^3 \sim 10^7 \text{ d}^{-1}$ ）に比べて極端に低く、かつ温度補償制御されている（ $Q_{10} = 1.0 \sim 1.1$ 、生物時計の第二の性質）。これらは、ATPase活性を化学的に制御しているタンパク質構造や動態が物事の本質であることを示している。

構造解析に着手してから9年後の2015年、KaiCのATP加水分解反応に関する構造基盤を発表した⁽⁷⁾。加水分解とはその名の通り、ATPの末端（ γ ）リン酸基のリン原子（ P_γ ）に水分子（W1）を反応させ、ADPとPiに分解する過程である。よって反応効率を考えるうえで、ATPに対するW1の空間配置が重要となる。ここでは図4の模式図をもとに、 P_γ とW1の酸素原子（ O_{W1} ）の距離（ $d_{P_\gamma-O_{W1}}$ ）、 P_γ から隣接酸素原子（ $O_{3\beta}$ ）と O_{W1} を見込む角度（ $\angle O_{3\beta}-P_\gamma-O_{W1}$ ）、この2つのパラメータに焦点を絞って説明する。ATP加水分解が S_N2 型の求核置換反応であるとする、 O_{W1} が $P_\gamma-O_{3\beta}$ の結合軸に沿うように P_γ に接近（求核的攻撃）するのが最も至適な反応経路となる（ $\angle O_{3\beta}-P_\gamma-O_{W1} = 180^\circ$ ）。しかしながら、KaiCの O_{W1} は $d_{P_\gamma-O_{W1}} = 3.8 \sim 4.6 \text{ \AA}$ 、 $\angle O_{3\beta}-P_\gamma-O_{W1} = 141 \sim 154^\circ$ の位置に確認され、他のATPaseよりもATPから遠くかつ反応に不利な配置にあることがわかる。実験的に決定したタンパク質構造をもとに理論化学的な計算を行ったところ、立体障害のためにW1は加水分解に適した位置（図4の十字、 $d_{P_\gamma-O_{W1}} = 3.0 \text{ \AA}$ 、 $\angle O_{3\beta}-P_\gamma-O_{W1} = 180^\circ$ ）には全く侵入できず、逆に、それほど安定化されていないため容易に他の場所へ散逸してしまうことがわかった。これが、KaiCのATPase活性を極端（24時間周期にマッチする程度）

に低くしている原因の一つである。活性の高いATPaseであっても、W1が求核攻撃する際の活性化エネルギーは $11 \sim 17 \text{ kcal mol}^{-1}$ に達することが知られている^[9-11]。KaiCのATPaseがより大きな活性化エネルギーを要することは想像に難くない。

著しい低活性（ 12 d^{-1} ）とはいえ、W1の進入を防ぐ立体障害は1日に12回程度解消され、加水分解へのゲートが開かれるはずである。我々はADP結合状態の結晶構造解析に成功し、加水分解前後での構造比較を通して立体障害の解消過程の一端を解明した。立体障害を取り除くためには、3本の α ヘリックスを大規模に移動させつつ、同時にSer145-Asp146間のペプチド結合をcis型からtrans型へ異性化させる

必要がある（図5）。ポリペプチド鎖の異性化はタンパク質分子の運動の中でもかなり遅い部類にあたる^[12]。局所的な異性化であったとしても $14 \sim 16 \text{ kcal mol}^{-1}$ の活性化エネルギーが必要になることが判明した。これが、KaiCのATPaseを低活性化させている別の要因である。

「W1を P_γ に接近（ $>11 \sim 17 \text{ kcal mol}^{-1}$ ）」させるためには、「 α ヘリックス群をシフト（ $? \text{ kcal mol}^{-1}$ ）」させつつ、同時に「ペプチド結合を異性化（ $>14 \sim 16 \text{ kcal mol}^{-1}$ ）」させなくてはならない。これらのイベントが反応座標上でどれくらい近接（共役）しているかについては未解明な点が残されているため、今のところ正味の活性化エネルギーを正しく計算することは難しい。

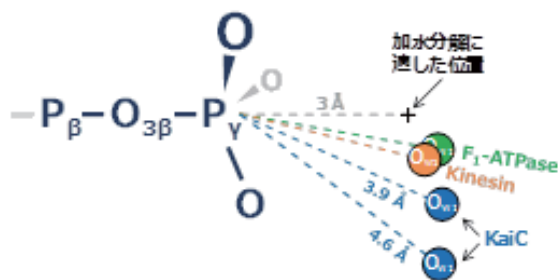


図4 ATPと加水分解水（W1）の位置関係を示した模式図。図は文献(7)より改変。

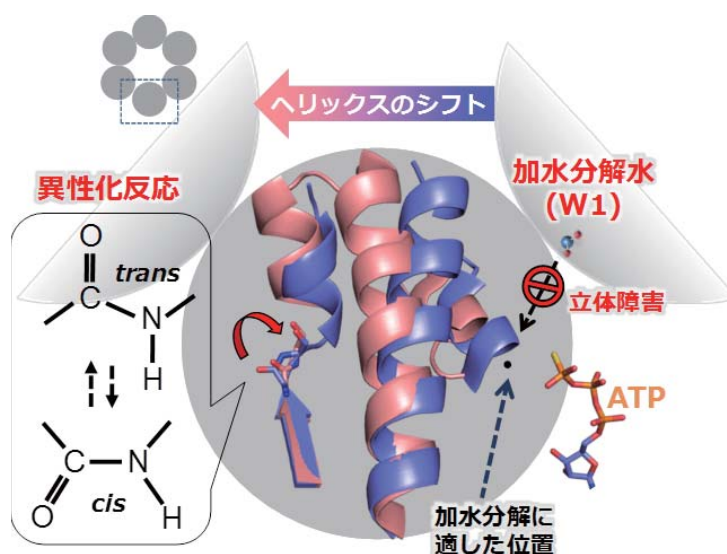


図5 KaiCのATP加水分解反応を遅くしている構造的要因。図は文献(7)より改変。

303.15 K下で 10^{12} s^{-1} の頻度因子を想定すると、 12 d^{-1} (0.5 h^{-1}) の反応速度を説明する活性化エネルギーは約22 kcal mol⁻¹と見積もられる。これは一連の構造転移が個別というよりも一体となって進行することにより、非凡なまでに低く安定したATPase活性が実現されていることを示唆する。

今後の展望

我々は2012年に分子研で研究グループを立ち上げ、「①概日周期での発振」を取っ掛かりに24時間周期を定める遅さの根源へと研究を展開し、今後は「②温度補償性」そして「③同調能」に関する理解を深め、最終的には時間を扱う生物学（時間生物学）を分子科学の観点から極めたいと考えている。①については相応の手ごたえが感じられ

つあるものの、生物時計の理解が3大性質（①～③）を漏れなく同時に説明することだとすると、我々の到達点はまだまだ道半ばということになる。

次の目標は①と②を同時に説明することである。遅い化学反応は高い活性化エネルギーを有することが多く、温度依存的に加速されるのが一般的である。時計の針が一定の速度で進むよう、周期を定めているKaiCのATPaseは厳密に温度補償制御されている。究極的に遅い化学反応を厳密に温度補償制御するために消費されるエネルギーがほんの僅か（一日あたり12 ATP）であることにも首をかしげずにはいられない。いつの日かこの自然の叡智を理解し、そう遠くない未来にモノづくりや環境低負荷型の情報処理に活かせるものであろうか。

謝辞

向山厚博士、古池美彦博士、阿部淳博士をはじめとする研究グループの同僚、そして近藤孝男博士（名古屋大学）、山下栄樹博士（大阪大学）、斎藤真司博士（分子科学研究所 理論・計算分子科学領域）、森俊文博士（分子科学研究所 理論・計算分子科学領域）をはじめとする多くの共同研究者に恵まれ、今まで研究活動を継続することができました。この場をお借りして御礼申し上げます。誌面の都合上、また読み易さを優先するために科学的な説明を一部省略して記述しました。詳細については別に記した総説⁽¹³⁻¹⁵⁾などを参照して頂ければ幸いです。

参考文献

- [1] アリストテレス全集3 自然学、出隆／岩崎允胤訳、岩波書店、1968年。
- [2] M. Ishiura, S. Kutsuna, S. Aoki, H. Iwasaki, C.R. Andersson, A. Tanabe, S.S. Golden, C.H. Johnson, and T. Kondo, Expression of a gene cluster *kaiABC* as a circadian feedback process in cyanobacteria, *Science*, **281**, 1519-1523 (1998).
- [3] M. Nakajima, K. Imai, H. Ito, T. Nishiwaki, Y. Murayama, H. Iwasaki, T. Oyama, and T. Kondo, Reconstitution of circadian oscillation of cyanobacterial KaiC phosphorylation in vitro, *Science*, **308**, 414-415 (2005).
- [4] S. Akiyama, A. Nohara, K. Ito, Y. Maéda, Assembly and Disassembly Dynamics of the Cyanobacterial Periodosome, *Molecular Cell*, **29**, 703-716 (2008).
- [5] Y. Murayama, A. Mukaiyama, K. Imai, Y. Onoue, A. Tsunoda, A. Nohara, T. Ishida, Y. Maéda, K. Terauchi, T. Kondo, and S. Akiyama, Tracking and visualizing the circadian ticking of the cyanobacterial clock protein KaiC in solution, *The EMBO Journal*, **30**, 68-78 (2011).
- [6] A. Mukaiyama, M. Osako, T. Hikima, T. Kondo, and S. Akiyama, A protocol for preparing nucleotide-free KaiC monomer, *BIOPHYSICS*, **11**, 79-84 (2015).
- [7] J. Abe, T. B. Hiyama, A. Mukaiyama, S. Son, T. Mori, S. Saito, M. Osako, J. Wolanin, E. Yamashita, T. Kondo, and S. Akiyama, Atomic-scale Origins of Slowness in the Cyanobacterial Circadian Clock, *Science*, **349**, 312-316 (2015).
- [8] Y. Furuie, J. Abe, A. Mukaiyama, and S. Akiyama, Accelerating in vitro studies on circadian clock systems using an automated sampling device, *Biophysics and Physicobiology*, **13**, 235-241 (2016).
- [9] M.J. McGrath, I.F. Kuo, S. Hayashi, and S. Takada, Adenosine triphosphate hydrolysis mechanism in kinesin studied by combined quantum-mechanical/molecular-mechanical metadynamics simulations, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 8908-8919 (2013).
- [10] B.L. Grigorenko, A.V. Rogov, I.A. Topol, S.K. Burt, H.M. Martinez, and A.V. Nemukhin, Mechanism of the myosin catalyzed hydrolysis of ATP as rationalized by molecular modeling, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **104**, 7057-7061 (2007).
- [11] S. Hayashi, H. Ueno, A.R. Shaikh, M. Umemura, M. Kamiya, Y. Ito, M. Ikeguchi, Y. Komoriya, R. Iino, and H. Noji, Molecular mechanism of ATP hydrolysis in F1-ATPase revealed by molecular simulations and single-molecule observations, *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 8447-8454 (2012).
- [12] M. Karplus, Aspects of protein reaction dynamics: deviations from simple behavior, *J. Phys. Chem. B*, **104**, 11-27 (2000).
- [13] 向山厚, 阿部淳, 孫世永, 秋山修志, タンパク質の化学反応が細胞内の時を計る, *実験医学*, **33**, 3119-3122 (2015).
- [14] 秋山修志, 時間生物学と放射光科学の接点, *放射光*, **29**, 56-63 (2016).
- [15] 秋山修志, 概日時計因子の構造や動態を調べる意義とは?, *生物物理*, **56**, 266-270 (2016).

主任研究員制度

分子研の研究施設に主任研究員という新たな研究職員を置くことが可能になった。正規の研究教育職員の教授、准教授、助教と同じ枠に入るが、研究施設全体でも5人を越えない程度の運用を想定している。主任研究員には内部昇格はなく転出が推奨されるが、任期等は設定しないため定年の65歳まで在籍は可能である。

規則改正により、現在、UVSOR施設、機器センター、装置開発室に置けるようになった。今後、岡崎共通施設の計算科学研究センターにも置けるように規則の改正を検討する予定である。各研究施設の正規研究職員定員内での雇用が原則である。正規研究職員の定員がない研究施設（機器センター、装置開発室は、創設時には研究職員定員があったが、改組の結果、なくなった）もあるため、所全体の定員内での運用も認められる。なお、研究施設の長期ビジョン（経費の確保を含めて）がなければ雇用は認められない。まずは各研究施設の今後の在り方をしっかり考えるのが先である。

大学と大きく異なる分子研の特徴のひとつに、各研究施設の高度な研究支援環境や技術職員の高い技術力を研究に生かせることがある。これは大学共同利用機関に必要とされていることではあるが、分子研では新任グループの研究の立ち上がりが大学に比べて圧倒的に早い理由にもなっている。このように分子研の研究施設は、分子科学を志す研究者が所内と所外を行き来しながら高度な研究を進める上での基盤となっており、研究動向に即した整備（設備＋技術力）を継続的に図っていく必要がある。

研究職員は10年前後（准教授、助教）から20年程度（教授）で転出している。その一方、流動性がほとんどない技術職員は40年間程度（65歳までの再雇用を含めて）在籍する。今、分子研は創設43年目に入ろうとしている。創設期の若手技術職員たちは全員、研究施設所属の研究職員と連携して研究施設を立ち上げてきた経験を有するが、彼らが退職していく時期が迫っている。在籍期間に差があることなどで技術職員と研究職員の連携が薄れ、各研究施設で研究動向に即した整備（設備＋技術力）が遅れ気味になってきているのではないかと危惧がある。分子科学研究の先端性・国際性を今後も発揮していくために、世界的な研究動向を踏まえた基盤整備を行うとともに、流動性の高い研究職員と流動性の低い技術職員の連携を長期的に確保するために新たな研究職員を研究施設に置くことが必要であるという判断に至った。それが主任研究員である。

主任研究員がどういうものであるかを一般的に説明するのは却ってわかりにくくなるために、もともと要求度の高かったUVSOR施設（現実員は教授1、准教授2、助教4、技術職員7。定員上、准教授1が空席。）で説明する。

UVSOR施設の光源加速器UVSOR-Ⅲは2012年に究極の性能に達し、世界最先端放射光施設のひとつに仲間入りした。施設の運転経費や実験経費は基盤的経費に含まれているため、予算は安定しており、今後、適度のメンテナンスを続けることで20年以上の運転が可能である。

UVSOR-Ⅲの光源性能をフルに活かした軟X線分光や光電子分光の先端分

光装置群を開発・導入し続け、世界の第一線の研究者の要求に応じていけば、長期にわたって国際競争力が維持できる状況になっている。それには、世界動向を先取りできるくらいのX線光学や電子光学の研究開発力のある、専任の研究職員＝主任研究員が不可欠である。

主任研究員は、特徴ある装置の利用研究の成果をベースに10年前後で転出していく研究職員とは明らかに位置付けが異なる。海外放射光施設のbeamline scientistと呼ばれる職種に近いかも知れないが、主任研究員の方は特定のbeamlineにずっと張り付いて共同利用支援をするわけではない。世界的には約10年ごとに先端分光技術（X線光学、電子光学）にブレークスルーが起きている。それに遅れることなく予算を確保して新たな研究開発を進め、高度な共同利用を継続的に実現していく役目を持つ。と同時に、主任研究員の下で技術職員の国際性や技術力の先端性も確保される。

（小杉 信博 記）

川合眞紀所長に AVS Medard W. Welch Award 2016

石崎章仁教授に第18回サー・マーティン・ウッド賞

川合眞紀所長に AVS Medard W. Welch Award 2016



Medard W. Welch Award は Welch 氏が米国 AVS (旧 American Vacuum Society) の設立とその後の支援に対して主導的な活動をされたことを記念して 1969 年に設けられました。AVS の表彰の中で最高賞と目されており、日本人では初めての受賞です。第 63 回 AVS シンポジウムにおいて 11 月 9 日に授賞式が行われました。受賞理由は “For elucidation of the role of vibrational dynamics in single-molecule reactions at surfaces” (表面での単分子反応における振動ダイナミクスの役割の解明) です。

固体の表面は本質的に不均一なので、巨視的な分光法では現象の統計的な分

布と合わせて、場の不均一性を考慮する必要があります。1980 年台後半に走査トンネル顕微鏡 (STM) が発明され、場を特定した分子分光が可能になりました。固体表面に吸着した一つの分子からの分光情報を取得することで、純粋に統計的な処理から現象を追跡することが可能になりました。フロンティア軌道に当たるエネルギー領域の電子状態密度、分子振動の計測も今世紀に入り可能になり、STM を使って単一分子の分光及び反応の研究に力を注ぐことにしました。開拓途上の分光研究には日々新たな発見があり、科学研究の楽しさを満喫したように思います。

2005 年あたりまでは定性的な研究が主流でした。電子の非弾性トンネル過程では振動状態の励起は振動の状態密度 (PDOS: phonon density of state) と線型性があるのですが、トンネル電流は非弾性過程と弾性過程の総和を計測しているため、PDOS を直接計測す

る方法が求められていました。アクシヨンスペクトロスコピーとは、化学反応の効率を STM の印加電圧の関数で現すことで、PDOS を直接反映する数値が得られます。理論シミュレーションを併用することで、固体表面での分子反応の詳細にまで言及できるようになりました。光を使った分光学の専門家からは、選択則はどうなっているのか、という問いを頻繁にいただきました。電子による励起過程は、共鳴励起機構です。実験データの中から、その証拠が出て来た時には、爽快な気分になったことを今でも思い出します。

多くの方々の協力があって研究成果を出すことができ、かつ、名誉ある賞をいただくことになったこと、皆様に感謝しております。素晴らしい研究仲間に恵まれたことは本当に幸せでした。

<http://www.avs.org/Awards-Recognition/Professional-Awards/Medard-W-Welch-Award>

(川合 眞紀 記)

石崎章仁教授に第18回サー・マーティン・ウッド賞

サー・マーティン・ウッド賞は日本の研究機関において凝縮系科学の分野で優れた業績を挙げた40歳以下の研究者に対して授与されるとのことで、このたび「実時間量子散逸系理論の開発とその分子系励起ダイナミクスへの展開」の業績に対して受賞させて頂きました。

奇しくも30代最後の誕生日となった11月11日、英国大使館大使公邸において授賞式が厳かに挙行政され、駐日英国大使 Timothy Hitchens 閣下より賞状と記念メダルを頂戴いたしました。今年で第18回を数えるサー・マーティン・ウッド賞ですが、受賞者としては私でちょうど20人目、また、理論研究者への授与は2人目とのことで大変な感激とともに些か恐縮しております。日本国内では物理学とも思われず化学とも見なされないような事を隙間産業的にひっそりこっそり研究する透明な存在でしたので、このような栄誉ある賞を受賞させて頂くことになり大変光栄に存じます。

本賞の大きな特徴の一つは、受賞者

には日英の科学技術交流の一助となることが期待されており、オックスフォード大学をはじめとする英国各地の主要大学および独逸シュトゥットガルトにあるマックス・プランク固体物理学研究所への講演旅行の機会を与えられることです。理論研究の本質的な原動力はオフィスに篋る作業以上に inspiring な議論ですので、講演旅行中の新たな出会いを今から楽しみにしております。

今後も凝縮系の物理学および物理化学に携わる研究者として、頂いた賞の名に恥じぬ様より一層の精進を重ねてまいる所存でございます。また、自分よりも若い世代の人々にとって「こんな物理の理論研究もあっていい」「こういうタイプの理論化学があってもいい」と選択肢が増え、関係する分野がより多様になればと夢想しています。



英国大使館大使公邸にて挙行政された授賞式において、Hitchens 駐日英国大使から賞状を受け取る筆者。

最後になりましたが、受賞に際して大変お世話になりましたオックスフォード・インストルメンツ株式会社の皆様、選考委員長・福山秀敏先生をはじめ選考委員の先生方、本賞に推薦して下さいました日本物理学会会長・藤井保彦先生、長年に渡りご指導・ご助言いただきました京都大学・谷村吉隆先生ならびにカリフォルニア大学バークレー校・Prof. Graham Fleming に心より御礼申し上げます。

(石崎 章仁 記)

第13回エクストリームフォトリクス研究会

去る2016年11月14-15日に、愛知県蒲郡市のホテル竹島において標記研究会が開催された。本研究会は、平成17年度から分子科学研究所と理化学研究所が連携融合事業として推進してきた「エクストリーム・フォトリクス研究」の一環として開催された。毎年、特定のテーマについて集中的な議論を行ってきたが、2012-2015年度は理研が光拠点シンポジウムの幹事業務やエクストリームフォトリクス事業の中間評価等で忙しかったため、合同シンポジウムは開催していない。そこで今回は各PIからこの4年間の進展や現状等を総括する講演が行われた。また、今年の4月に着任された分子研の川合眞紀所長による特別招待講演があった。

プログラムを以下に掲載する。このように、先端光源の開発、プラズモニクス、テラヘルツ応用、精密計測、量子シミュレーション、界面科学、メタマテリアル、画像処理、生命科学、中性子計測など多岐に渡る分野での光科学技術の世界最先端を俯瞰できる非常に有用な機会となった。また質疑応答では、これらの異分野間の議論が活発に行われ、今後の連携研究に結びつく極めて有意義な研究交流であった。川合所長はご自身の研究経歴の紹介に続いて、これまで常に世界の最先端で果敢な挑戦を続けて来た表面科学のフロンティアについて重厚な講演をされた。この講演から様々

なインスピレーションを受けた参加者も多かったのではないだろうか。これらに加えて、口頭発表ではカバーできなかった研究の詳細や今後の展開等について若手研究者による24件のポスター発表が行われ、両研究所の研究者の間で活発な意見交換が行われた。

今回もほとんどの参加者が、会場と

なったホテルに宿泊し寝食を共にした。異分野、異文化の研究者達が、ともに夜風に吹かれながら仲良く露天風呂につかり親交を深めた。今回の研究会は、これら両研究所の異分野の研究者達が共通の興味や将来の夢について議論する貴重な機会を提供したと思う。

(大森 賢治 記)

プログラム

11月14日(月)

- 13:00 開会の辞 大森 賢治 (分子科学研究所)
- 13:10 緑川 克美 (理化学研究所) 「高次高調波によるアト秒量子波束の観測」
- 13:35 岡本 裕巳 (分子科学研究所) 「プラズモン物質の局所的光学活性」
- 14:00 大谷 知行 (理化学研究所) 「テラヘルツセンシングとイメージング」
- 14:40 香取 秀俊 (理化学研究所) 「光格子時計の比較で見えること」
- 15:05 大森 賢治 (分子科学研究所)
「アト秒精度の超高速コヒーレント制御を用いた量子多体ダイナミクスの探求」
- 15:30 田原 太平 (理化学研究所) 「新しい界面選択的超高速分光の開発と水表面の水和電子の観測」
- 16:10 川合 眞紀 (分子科学研究所・所長)
特別講演「金属に吸着した分子のスピン状態: SOI splitting and/or Kondo state」
- 17:00 ポスターセッション
- 18:30 自由討論

11月15日(火)

- 9:30 和田 智之 (理化学研究所) 「社会課題解決に向けた光量子研究」
- 9:55 田中 拓男 (理化学研究所) 「赤外吸収メタマテリアルとその応用」
- 10:20 南出 泰重 (理化学研究所) 「非線形光学に基づくテラフォトリクス研究の最先端」
- 11:00 平山 秀樹 (理化学研究所) 「半導体発光デバイス未踏領域の進展と展望」
- 11:25 平等 拓範 (分子科学研究所) 「ドメイン制御による小型高輝度レーザー」
- 11:50 藤 貴夫 (分子科学研究所) 「キャリア・エンベロープ位相も決定できる周波数分解光ゲート法」
- 13:45 横田 秀夫 (理化学研究所) 「科学画像を対象とした多次元画像処理」
- 14:10 中野 明彦 (理化学研究所) 「超解像ライブイメージングによって次々に書き換えられる膜交通の仕組み」
- 14:50 加藤 政博 (分子科学研究所) 「自由電子による光渦放射」
- 15:15 大竹 淑恵 (理化学研究所) 「理研小型中性子源システムRANSによる非破壊観察、評価分析技術」
- 15:40 閉会の辞 緑川 克美 (理化学研究所)



01 第76回岡崎コンファレンス “Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications”

報告：極端紫外光研究施設 教授 小杉 信博、光分子科学研究領域 教授 解良 聡

去る2016年11月22日～25日に、岡崎コンファレンスセンターにおいて、表記国際会議が開催された。岡崎コンファレンスは、分子科学ならびに関連分野における中心的課題を集中して議論する場として分子研が主催するもので、研究所創設以来約40年の歴史を有する。今回は有機分子材料のアドバンス光電子分光をテーマに掲げ、解良が組織委員の代表として申請し、採択後、実質的なところで小杉教授から多大なる協力を得て実行した。参加者は外国人招待講演者16名（その多くは旅費を自己負担しての参加）、日本人招待講演者13名を含めて92名であり、例年の岡崎コンファレンスと比較すると比較規模の大きな会議となった。

今世紀に入り、エネルギー・環境問題が露わに指摘されるようになり、これらを解決すべく多種多様な分野で次世代産業基盤の確立を目指した研究が進められている。特に複雑な分子化合物がありなす多彩な機能性発現に注目が集まっており、分子材料を積極的に

用いたエネルギー変換・情報変換デバイス開発などに期待が寄せられている。これらの材料群の特徴としては、固相における集合構造が極めて多彩であり、弱い相互作用で諸物性が顕著に変化しうること、また異種分子や無機材料との接触界面において、組成変化や構造変化を伴うことで、その分子特性が大きく変化していることにある。そのため、分子固体やその界面における電子論的な物理学的視点の研究が進められると同時に、電気化学・触媒反応のような化学的視点の研究も盛んである。このように比較的広範なコミュニティを抱える分野においては、積極的に異分野研究者間の接点を増やす機会を設け、新たな融合・連携を通じた分野横断型発想を啓発することも必要である。本会議では研究手法の観点からより限定的に対象を絞ることでベクトルを揃え、問題点の明確化と基礎学術分野拡大の相乗効果を狙った。つまり「複雑系のスペクトロスコピー」を共通言語とした会議進行である。機能性

の発現機構を理解するために、電子分光法による電子状態の精緻な評価は極めて重要であり、さらに将来的にはより詳細な知見を得るために、従来型計測法を打破する新しい発想に基づいた計測技術の開発も必要である。歴史的背景から、こうした複雑系の光電子分光は、日本、スウェーデン、ドイツが主導してきた。ドイツは今世紀に入ってから物理系研究者の参入が顕著であり、精密な界面構造解析を元にした電子状態議論において、若手を中心として極めて精緻な実験報告が多く発信されている。スウェーデンは実験手法の技術的な鍵となる光電子分光装置のエネルギー分析器開発の先駆的立場を維持しており、新規計測法の開発も継続されている。我が国は、関一彦教授（故人）、上野信雄教授らが有機デバイスを中心にした基礎研究の発展はもちろんのこと、本会議の基盤となるコミュニティの構築に早くから国際的な視点でご尽力されてきた歴史的背景がある。また電子分光法が密接にリンクするコ



コミュニティとして放射光施設があるが、UVSOR施設の得意とする先端軟X線高輝度光源施設の連携・発展もコミュニティ強化には重要な因子であり、期間内に随時施設見学会を開催し、情報交換につとめた。

本会議では、機能性有機分子の固相、液相、種々の表面および界面における電子状態について、先端分光法を駆使した研究成果を報告し議論する場を提供した。議論するテーマは方法論で分けて5テーマであり、それぞれ講演は半日ずつ、計2日半となった。具体的には、1) 分子固体や液体とその表面および電極界面等における各種スペクトロスコピー、2) シンクロトロン光を用いた光電子分光、軟X線吸収・発光測定、3) 時間分解・多重励起・先端光電子分光測定、4) 多次元光電子分光や光電子放射顕微鏡によるイメージング測定、5) 準大気圧下や外場印加下などのオペランド分光測定である。この2日半の会期にKeynote講演として3名の第一線の研究者を招聘した。有機分子薄膜界面の時間分解・2光子励起光電子分光の第一人者であるHöfer教授（独）からは、“Time-resolved spectroscopy of electron transfer processes at metal/organic interfaces”と題して、複雑な光電子放出過程についての導入から先端研究成果の紹介までを網羅していただいた。有機分子のエネルギーバンド分散関係測定の第一人者である山根助教（分子研）からは、“Valence-band dispersion in organic thin films and interfaces”と題して、有機固体の分散関係測定の歴史経緯から、最先端の極微小分散関係の測定例までを紹介していただいた。雰囲気下光電子分光の第一人者であるSchnadt教授（スウェーデン）からは、“Ambient pressure XPS in the real-time monitoring of thin film growth”と題して、準大気圧下まで

試料環境を変えた時の影響とその電子状態変化についての最新成果をご紹介いただいた。また分析研究者を多く抱える本コミュニティへの刺激的な話題提供としてHot Newsセッションを設け、分子研の山本教授に、“Electronic phase-transitions at an organic interface”と題して最近の有機系強相関材料の基礎研究の成果についてご講演いただいた。以下にその他の招待講演者を挙げる。

Michael Zharnikov (Heidelberg, Germany)

Oliver L.A. Monti (Arizona, USA)

Susumu Yamamoto (Tokyo, JPN)

Stephan Kümmer (Bayreuth, Germany)

Achim Schöll (Würzburg, Germany)

Daniel Löffner (Graz, Austria)

Torsten Fritz (Jena, Germany)

Hisao Ishii (Chiba, JPN)

Yasuo Nakayama (TUS, JPN)

Steffen Duhm (FUNSOM, China)

Peter Krüger (Chiba, JPN)

Heiko Peisert (Tübingen, Germany)

Hirofumi Yoshida (Chiba, JPN)

Patrik Amsalem (Humboldt Berlin, Germany)

Koki Akaike (TUS, JPN)

Lothar Weinhardt (KIT, Germany)

Faris Gel'mukhanov (KTH, Sweden)

Masanari Nagasaka (IMS, JPN)

Hiroshi Kondoh (Keio, JPN)

Xianjie Liu (Linköping, Sweden)

Niclas Johansson (Lund, Sweden)

Payam Shayesteh (Lund, Sweden)

Yasumasa Takagi (IMS, JPN)

Takanori Koitaya (Tokyo, JPN)

Masaaki Yoshida (Keio, JPN)

講演リストからも明らかな様に、次世代へ繋げる分野展望を意識して中堅研究者に若手研究者を加えた講演者構成とした。さらに若手研究者、学生を中心として32件のポスター発表があり、分野の裾の広さを感じさせるものであった。本会議では会議時間以外にも有効な議論時間を見出してもらうことを想定して、参加者には機構ロッジに宿泊してもらった。時に深夜まで議論は続いたようであり、結果として非常に活発な交流が実現でき、岡崎コンファレンスの主たる目的となっている、将来に向けての新たな友好関係が構築されたようである。なお、岡崎コンファレンス終了後、外国人のほとんどを引き連れて犬山での一泊温泉旅行を楽しんだ（解良グループと小杉グループが対応）。

最後に、多忙な中、本会議に参加していただき活発な議論を行っていた全参加者に謝意を表すると共に、本会議の刺激を通じて、機能性分子材料の新たな機能が解明され、次世代科学への活路が見出されることを期待したい。



02 アジア連携分子研研究会 Japan-Korea-Taiwan Bioinorganic Chemistry Symposium (日韓台生物無機化学シンポジウム)

報告：岡崎統合バイオサイエンスセンター 教授 青野 重利

2016年9月29～30日の2日間、岡崎コンファレンスセンターにおいて「Japan-Korea-Taiwan Bioinorganic Chemistry Symposium (日韓台生物無機化学シンポジウム)」と題したアジア連携分子研研究会を実施した。

生体内に含まれる様々な金属元素は、多くの場合イオンの形で存在し、タンパク質、核酸、糖などの生体分子と強く相互作用して機能性生体金属分子を形成している。中でも、様々な生体反応を司る金属酵素や、エネルギー・電子移動を司る金属タンパク質では、遷移金属イオンと生体分子間の巧妙・精緻な相互作用（金属－生体分子間相互作用）を介して、ユニークな構造体を構築することで、金属の持つ多彩な化学的機能（小分子の結合と活性化、酸化還元反応、電子／プロトン移動反応、光反応、加水分解反応など）を最大限に引き出し、それを利用している。このような生体金属分子の機能解明と

応用をめざした研究分野は、生物無機化学と呼ばれ、世界各国で活発に研究が行われている。特に最近の生化学分野における各種分析手段の発展により、生体金属分子の構造と機能の相関関係の詳細が明らかにされつつあり、それらを利用した新しい触媒、機能性材料、医薬品、医療技術などの開発をめざした応用研究も活発に行われている。

本研究会では、最近特に発展の目覚ましい日本、韓国、台湾で活躍する生物無機化学分野の研究者が一堂に会して、最新の研究成果を発表し、情報交換を行うと共に、研究者間の友好関係を深めることを目的とした。本研究会では、多くの若手研究者（若手の教授、准教授、助教、博士研究員）による23件の講演を行うと共に、国内の学生や博士研究員にも参加を呼びかけ、これからの当該分野を担う若手研究者の育成に重点を置いた。研究会には、韓国から7名、台湾から6名、日本から32

名が参加した。

本研究会では、(1) 小分子の活性化、(2) 人工金属酵素の開発、の二つをメインテーマとして設定した。(1)については、遷移金属錯体や、遷移金属酵素による小分子（酸素、水素、二酸化炭素、一酸化窒素、メタン、水など）の活性化機構の解明、およびそれを利用した新しい触媒系の開発、最近の環境問題やエネルギー問題の解決に向けた最新の研究成果について議論した。(2)については、これまでに蓄積されてきた錯体化学、触媒化学、金属酵素化学の情報を集約し、天然の酵素触媒を超えるような選択性と安定性を実現する人工金属酵素触媒の開発に関する最新の研究成果について議論した。





分子研の効きめ



田所 誠

(東京理科大学理学部第一部化学科 教授)

たどころ・まこと／1989年東京理科大学大学院理学研究科修士課程を修了後、1992年九州大学大学院理学研究科博士後期課程単位取得退学・博士(理学)、1992年～1994年分子科学研究所関連領域研究系関連分子科学第一助手として勤務、1994年～2004年まで大阪市立大学理学部化学科に助手～助教授、2005年から東京理科大学理学部化学科に移り、2008年から現職。2012年から東京理科大学総合科学院分子連関相乗系研究部門長を兼務。研究テーマ：プロトン電子連動系、ナノ水分子クラスターの物性、有機無機伝導体、分子マシンなど。

「分子研出身者の今」の原稿依頼を引き受けて、改めて昔を思い返してみると、分子研の退所からすでに20年も経過していることに気がついた。実に時間の流れは早いものだと思う反面、「自分がいったい分子研で何をやってきたのか」を思い返してみた。

分子研に入所したての1992年は、まだ私が博士課程を出たばかりで、九大(九州)譲りのバイタリティーに溢れ、研究も、遊びも、お酒も、何でも吸収していた時期であった。当時、所属していた関連領域研究系のボスは阪大名誉教授の中筋一弘先生であり、「構造有機化学」分野の大家であった。もちろん、私は「錯体化学」を専攻して学位を取った新進気鋭の無機化学者であったので、全く分野の異なるものを助手として採用して頂けることは、実に分子研らしいことであった。実質2年半しか分子研にはいなかったが、その間に築き上げた人間関係や共同研究のテーマは、今でも継続しており、掛け替えのない時間を過ごさせてもらったと思っている。

その頃の分子研は、明大寺地区しかなく分子研・生理研・基生研が集中しており、山手地区はただの広い運動場であった。私たちが研究していた南実験棟2階の実験室は、錯体実験施設に隣接していた。崖の上に建っており、狸の巣があったり、未だ自然が沢山

残っていた。私が錯体分野の出身であったため、施設の先生方や学生たちには、公私にわたってお世話になったので感謝したい。また、当時お世話になった故都築さんには、分子研でとれた銀杏の処理・食し方や分子研に生える冬虫夏草の見分け方などを習った。また、月末31日に割引になる31アイスクリーム、いつも変わらないサングリアのA定食、中国人留学生の本気度に驚いた卓球台、第1回額田の食い倒れラリー、鹿野田先生を監督にした野球チームに参加と、私生活は充実していたようである。

さて、研究生生活はどうかというと、中筋グループでは、当時の装置開発室の三谷忠興先生(物性物理)と連携した「プロトン電子連動系」のプロジェクトが走っており、錯体化学の立場から、私もこのプロジェクトに加えて頂けることになった。このプロジェクト研究では、錯体分子同士を直接水素結合させ、同時に電子系の移動を可能にする前代未聞の分子結晶を作ることが求められていた。しかし、2年間で達成した研究成果は、分子間水素結合と配位結合を同時に働かせて、分子結晶の構造制御ができる配位子を見いだしたところまでであった。一方、物性物理との共同研究でもあるので、その研究発表や考え方を学べたことはとても幸運だった。通常、錯体化学の研究者

は自分の得意とする化合物をもち、しばしば自分の研究が、その化合物や金属イオンに左右されてしまうことがよくあった。しかし、物性物理では、ある目的とする物性を達成するためには、どんな化合物でもこだわらないのである。これは目から鱗であった。一方、当時所属していた構造有機化学の分野では、全く逆に目的とする機能性をもつ新しい分子を合成するため、5～10年間は平気で費やすことが当たり前であった。分野によって、研究スタイルがこれほど違うのかと驚かされたものだ。

結局、分子研時代では「プロトン電子連動系」の機能性発現までは届かなかったが、20年間に、このテーマをコツコツと続けることができたため、現在になってやっと機能性に漕ぎ着けられた。これらは、どのように役立つかわからないものであり、今までなしえなかったテーマである。私は研究者として、ある意味で区切りをつけられたことに満足している。最近の大きな研究プロジェクトでは、3～5年の短期間に成果を出さなければならない。しかし、実際に大きな研究テーマになる前は、新しく些細な発見から発展するものがほとんどである。短期決戦型の成果優先では、本当に新しいテーマを研究・開拓することはできないだろう。恐らく、プロジェクトが終われば研究

も終わり、次の研究テーマに乗り換えていく研究者というのが一般的である。

分子研を卒業してから20年がたち、未だに研究できるテーマに巡り会えたことは、研究者人生として、とても有意義な出来事であった。逆に、このプロジェクトが本当に新しく、かつ斬新なテーマであったことは、不幸中の幸いだったのかもしれない。一方、このようなテーマを長く研究していると、研究に対する考え方にも変化が生まれてくる。すべての研究を、はじめの一歩から考え直してしまう癖がついてしまった。例えば、分野の異なる論文などを読んでも、自分の研究にどのようなことができるのか考えられるようになった。しかし、その新しいテーマを実現させるためには、結局、また～10年は必要とするのである。今まで

の研究人生は、ゆっくりと新しい研究テーマを解決する醍醐味を味わってきた感じがする。僅か2年半ほど分子研にいたことが、20年を経て徐々に自分の研究テーマへと染み渡り、今の自分にボディブローのように効いている。これはまさに「分子研の効きめ」ではないだろうか。

さて、現在行っている研究テーマの「プロトン電子系」以外の宣伝をしたい。直径～1.5 nmの一次元分子性ナノ多孔質単結晶中で安定化された準1次元の水分子クラスター構造の融解と凝固の相転移構造であ

る。X線結晶構造解析により、氷の構造だけではなく融解した水構造までも、はっきり決めることに成功した。人工メタンハイドレートや人工イオンハイドレートの合成にも成功している。未来材料、「人工クラスレートハイドレートの創成」、10巻(5月)、16–28(2010)。

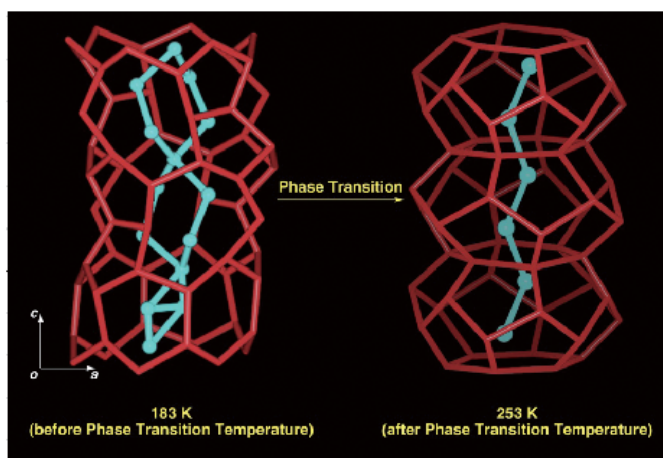


図 現在進行中のテーマ。



分子研を去って10年



鈴鹿 俊雅

(琉球大学理学部海洋自然科学科 准教授)

すずか・としまさ／2003年京都大学大学院理学研究科化学専攻修了。奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科CREST研究員、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所CREST研究員、三井化学株式会社触媒科学研究所を経て、2007年琉球大学理学部海洋自然科学科化学系助教、2011年同准教授。

ました。分子研着任時にお世話になった山田陽一先生や、分子研時代のポストドクメンバーの初々しい挨拶文を読みながら懐かしさに浸り、自分は一体どんなことを思っていたのだろうと探してみました。なんと「新任者紹介」を書いていなかったようで、見つけることができませんでした。そこで、今回は、ご挨拶も兼ね琉球大学での近況報告をさせて頂きたいと思います。

私は2004年4月から2007年2月ま

で、魚住研究室の博士研究員として2年11ヶ月、分子研で過ごさせて頂きました。当時の魚住研は、山手キャンパス3号館に引っ越したばかりで、なにもかもが新しいとても綺麗な研究室でした。実験室やセミナー室は、ただ新築で綺麗というだけでなく、非常に緻密に練られたレイアウトがなされており、測定室、リフレッシュルームやストックルームに至るまでこだわり尽くされた研究室でした。また、当時在籍

大迫先生から依頼を受け、「分子研出身者の今」というコラムの存在を知りました。分子研レターズのバックナンバーを読んでみると、以前は「OBの今」というコラムだったことや、他に「新任者紹介」というコラムもあることがわかり

していたスタッフ、博士研究員、大学院生、秘書さん達にも恵まれ、研究はもちろんです。毎週土曜日のラーメン屋巡り、不定期な飲み会など公私ともに非常に楽しく充実した研究生活を過ごすことができました。あのような研究環境を3年間も与えて下さった魚住泰広先生には、非常に感謝しております。あとにも先にも、あんなにも環境の整ったところで研究ができる機会はないと思います。

そんな分子研をあとにして、私は2007年3月に三井化学（株）に入社しました。袖ヶ浦にある三井化学の触媒科学研究所は、石油化学会社らしく広大な敷地の中に、研究棟や高圧ガス実験設備などが並びそのスケールの大きさは、これまで、大学、研究所だけしか経験のなかった私には、大変刺激的なものでした。研究所から覗く石油コンビナートの煙突から火がでている風景は、教科書でしか見たことのない昭和の感じの漂う風景でした。三井で私は、「プロピレンの二量触媒の開発」というテーマを行い、日々、禁水条件下での触媒作りを行っていました。分子研では、「水中での有機合成」を行っていたので、日々、グローボックスと格闘しながら、水や酸素を気にしないで有機合成ができることは、素晴らしいことだと、あらためて感じました。

2007年10月に私にとって、7つ目の研究場所となる琉球大学理学部に赴任しました。琉球大学は、沖縄県の中部に位置し、小さい島にありながらキャンパス面積は北大・筑波大について第3位と広大な敷地に建てられています。沖縄県唯一の総合大学で、医、理、工、農、法文、教育、観光学部の7学部から構成されており、約8000人の学生と1400人の教職員が在籍しています。私もこの1人として、日々、教育と研

究に携わることとなったわけです。こうして、琉球大学に赴任し、今度は、どんな研究室だろうと期待していたところ、琉球大学は一人ひと研究室ということで、私に小さな研究室が与えられました。ただ、どここの大学も同じだとは思いますが、与えられた研究室には、不用品（ゴミ）以外は何もありませんでした。実験器具や設備が不足しているのは当然ですが、学生が勉強する机や椅子さえもなかったのも、自爆営業を覚悟していた矢先、また、魚住先生が支援して下さい、研究室をスタートさせることができました。魚住先生には、ポストドク時代から現在に至るまで、本当に感謝の言葉もございません。

その後、質量分析をはじめとする分析機器や実験台などを導入することができましたが、その際も、以前、魚住先生が「研究室の立ち上げを見ておくと、あとで役立つよ」とおっしゃっておられたとおり、基本、魚住研と同じものを選定させて頂いています。毎年、学生を連れてオープンキャンパスで魚住研を訪問させて頂いているのですが、その際、学生が「魚住研は、うち（私の研究室）の研究室を大きく綺麗にした感じだ」と言うくらいです。確かに、いくら真似ても大きさと綺麗さは、どうにもなりませんが、一応、私が魚住先生から与えて頂いた研究環境の何百分の一かは、学生に還元できているのではないかと思います。また、研究室作りだけでなく、毎週の抄録会や研究報告会または飲み会に至るまで、魚住研で過ごした研究環境を思い出しながら、それに少

しでも近づけるように努力しているところです。

分子研で働いていたのが、ついこの前のように思えてなりません。あれからもう、10年が経とうとしています。なにも成し遂げないまま、研究室の立ち上げで10年が経ってしまいました。ボヤボヤしている間に、また、すぐ次の10年が過ぎていってしまいますので、目標をもって日々精進したいと思います。今、大学は、過渡期を迎えており、運営交付金の削減により、校費や人件費の削減を余儀なくされ、教員一人あたりのコマ数も増え続けています。校費は、年間13～14万と中学生になる私の子供のお小遣いより少ないので、大学の卒業研究は科研費が何かのプロジェクト予算頼りとなっています。こうした、厳しい状態で今後もっと厳しくなるようですが、せっかく頂いたポジションですから、楽しみながら、私に与えてもらったものを、少しでも学生に与えていければと思っています。分子研には、オープンキャンパスで年に一度は訪問したいと思っていますので、その時はどうぞ宜しくお願い致します。今回、執筆の機会を与えて頂きまして、本当にありがとうございました。また、執筆できる機会があればと思います。





“研究”という“幸福”を噛みしめて！

澤井 仁美

(兵庫県立大学大学院生命科学研究科 助教)

さわい・ひとみ／2006年 姫路工業大学大学院(現 兵庫県立大学大学院)生命科学研究科にて博士(理学)取得後、分子科学研究所 生命錯体分子科学研究領域 青野グループにてIMSフェロー・日本学術振興会特別研究員・特任助教を経て、2013年より母校にて現職。

(写真1) 現在の所属研究室メンバーと共同研究者 S. Samar Hasnain教授と姫路城でお花見。
前列右から2人目が筆者。



分子研を去ってから、もうすぐ4年が経とうとしています。大学教員という仕事は、分子研でポスドクとして研究に専念していた時期とは全く異なる忙しさがあります。所属大学では、研究室での学生教育や研究活動に留まらず、半年間ほぼ毎日続く学生実習や演習講義、推薦・センター・一般と続く入試業務、5つくらいの委員会、企業や地場産業との連携活動などが課せられています。さらに、私の立場では学生さん達と同じ環境で一緒に過ごす時間が長いため、日々のメンタルケアを含めて「いかに楽しく研究室生活を送ることができるか？」に配慮した研究室環境の整備力も要求されます。研究ばかりしていた頃は周囲の人々のための環境整備など考えたこともなかったのですが、大学の研究室は「研究とは何か？」をまだ知らず、多種多様な夢を持った学生さん達が構成されているため、「研究者になりたい」と思って配属される人は稀です。そのような状況で、研究室で過ごすことに抵抗をなくしてあげることができれば、学生さん達は気持ち良くたくさん実験をして、私が驚

くような良い成果をあげてくれます。現在の所属研究室は、毎年4～6名が内部大学院に進学し、博士課程リーディングプログラムの留学生(イギリス1名、バングラデシュ1名、マレーシア2名)も所属しており、常に15～18名の学生さん達と同じ部屋で過ごす日々は、まるで“相撲部屋のおかみさん”のようです(写真1)。自分自身のことは全く何もできておらず、あっという間に“アラフォー独女”と化してしまいました！

慌ただしい4年間ではありましたが、現在の上司(城 宜嗣教授)は私が“研究者”であるということを十分に理解してくださり、彼が理化学研究所にも研究室を持つ利点を生かして大型放射光施設SPring-8やX線自由電子レーザー施設SACLAを活用した研究の機会を与えてくださいました。私はタンパク質の構造機能解析が専門ですが、これまで誰も解明できなかったタンパク質の構造を観て、その機能メカニズムを明らかにしたいと常に思っています。最近、それを実現できる装置のセッティングに成功し、過去35年間に多くの研究者が挑戦したにも関わらず誰も観るがでなかったタ

ンパク質の構造を解明し、機能メカニズムを提唱することができました。このタンパク質の調製は学生さん達の努力によって比較的無難に行えたのですが、問題は装置開発でした。X線小角散乱法という古くから用いられている溶液散乱法を応用した装置なのですが、私自身がこの手法の利用や装置開発が初めてだったため、多くの研究者と知り合って、それらの人々の協力を大いに得る必要がありました。上司の協力もあり、イギリスの共同研究者とフラ



(写真2) 韓国慶州で開催された9th Korea-Japan seminars on Biomolecular Sciencesにて、青野教授と村木助教に再会。一番左が筆者。

ンスの放射光施設Soleilに出向き、最新鋭の装置を視察して実験する機会にも恵まれました。ようやく昨年の夏に、その装置をSPring-8の理研ビームラインBL45XU-SAXSに導入し、実用化に至ることができました。最近、分子研時代にお世話になった青野教授に本研究成果を発表する機会を与えていただき、懐かしい面々と再会して近況報告とともに装置の宣伝もすることができ、大変感謝しております(写真2)。

このような大学教育と研究活動の狭

間で、私は改めて“研究”という贅沢な“幸福”を噛みしめつつ、近い将来、また分子研で研究三昧の日々が送りたいなぁと大志を抱いています！

最後に……分子研で働くポスドクや総研大生の皆様へ；

分子研で過ごされる日々は、自由な発想で存分に研究に打ち込むことができる人生の貴重な期間だと思います。分子研の恵まれた環境を大いに活用し、世界へ羽ばたいてください。

覧古考新06 | 1996年

分子研の功績が五十年後に語られるとしたら何でしょうかね？

研究成果のどれが生き残って時代の試練に耐えるでしょうか。

私は個々の研究成果ではないかと思います。

私は分子研のいちばん大きな貢献は人間の流動を活性化したことだと思っています。こう言うと叱られるかもしれませんが。

分子研が助教授、助手をはじめ、技官や、最近では総合研究大学院大学の学生まで含めて、人事の流動性を維持しようとして来られたことを私は大変立派だと思っています。教授だけは停年まで任期がないという陰口もありますが、それとても二次、三次の波及効果まで考えると分子研の採用が生み出してきた流動活性化効果は大変なものです。はたから見ていると（時にはかなり無理をしてでも）人の流れを止めないように努力しておられるのがわかります。

.....

ときどき吹き付けてくるエリート臭さやお役人臭さに辟易しながらも期待しているのです。頑張れ。分子研様。

分子研レターズ No.34 レターズ「分子研の功績」(1996年)
小谷正博 (学習院大学教授 化学)



邨次 智助教に第10回PCCP Prize

この度、英国王立化学会より第10回PCCP Prizeを頂くことになりました。受賞となった研究は「Preparation, In situ Characterization, and Functionalization of Catalyst Surfaces by the Immobilization and Coordination Control of Multi-Metallic Complexes」で、そのほとんどを分子研在職中に行ったものです。当時在籍していたグループのPIである唯美津木准教授をはじめ、グループのみならず、また、ディスカッションにのっていただきました分子研の多くの先生方、職員の皆様にお世話になりました。この場をお借りして心よりお礼申し上げます。受賞研究の一例をあげますと、金属錯体、特に多核の金属錯体を酸化物担体表面に固定化しその配位構造を制御することで、金属錯体前駆体よりも高い触媒活性を示す固定化金属錯体の創出と局所配位構造解析に成功したとともに、その高活性の要因として、固定化金属錯体と表面間の界面結合に可逆的な組換が起こることをin-situ触媒構造解析を駆使することで提案しました。さらに、固定化金属錯体の配位子を鑄型分子とした反応空間を有する表面モレキュラーインプリンティング

触媒の創出を行い、触媒反応の選択性（形状選択性、位置選択性等）を制御することが可能であることを見出しました。

現在は固定化金属錯体を基盤としつつ、固定化する金属錯体や、固定化される担体を、目的に応じて選択しつつ、新しい研究の芽を出すべく対象を広げています。例えば、金属錯体構造にとらわれない新しい触媒活性点構造の創出と新規触媒反応開拓や、糖類やステロイド類等、より有用な化合物の選択的な官能基変換を目指した表面モレキュラーインプリンティング触媒の開発、金属錯体とカーボン担体を組み合わせた系による高耐久性燃料電池電極触媒の応用、などへと研究を展開しています。また、メタンや低級アルカンの有用化合物への選択的な変換を目指した酸化物担体そのものの開発も進めています。このように対象を広げつつも、分子研で培った、触媒構造を基軸にした触媒反応特性の理解、という基礎科学のバックボーンはぶれることなく、新規な研究を展開していきたいと考えています。

今後ともどうぞよろしくお願いいたします。



邨次 智（むらつぐ・さとし）

2009年東京大学大学院理学研究科博士課程修了。同年分子科学研究所助教。2013年より名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻（化学系）。2015年12月よりJSTさきがけ研究者（「革新的触媒の科学と創製」分野）兼任。

アウトリーチ活動 第110回分子科学フォーラムを終えて

2016年9月9日、第110回分子科学フォーラム、菅原潤一氏（Spiber株式会社・取締役兼執行役）による「クモ糸から始まる素材革命」をお聞きました。究極の材料であるタンパク質を人類が使いこなすことで、石油製品の多くを持続可能な天然由来の素材に置き換えていくことができるのではないか？というのがテーマ。クモの遺伝子から採ったクモ糸タンパク質の情報を他の微生物に導入し、培養させることで大量生産し、世界初の実用化を目指していらっしゃいます。学生時代に「恵まれた環境を与えられたからには何か面白いことをやってやろう」と会社を立ち上げられ、培養の効率の高い微生物を見つけるために遺伝子デザインから評価までを700回も繰り返されたそうで、探し当てたことで工業化の可能性が見えてきたというお話は、会場に



外国人研究職員の紹介

Prof. Amalendu Chandra

from India

Indian Institute of Technology (IIT) KanpurのAmalendu Chandra教授が、平成29年5月から平成30年度末まで、理論・計算領域の客員教授として滞在される予定です。Chandra教授は、Indian Institute of Science（バンガロール、インド）のBiman Bagchi教授の下、液体論とくに分子流体力学に基づく溶媒とダイナミクスや誘電摩擦などの理論研究で1991年に学位を取得されました。その後、British Columbia大のPatey教授のグループでのポストドクを経て、1993年に助教授としてIIT Kanpurに戻られ、2001年からは教授として様々な研究を展開されています。2002年にサバティカル制度を利用してルール大学（ボーフム、ドイツ）で1年程滞在した際に第一原理計算を習得され、その後、第一原理計算を利用した超臨界状態や亜臨界状態の液体構造の解析や二次元赤外スペクトルの解析にも研究を展開されています。さらに、固一液、液一液、気一液などの界面近傍や制限空間の構造やダイナミクスなど、第一原理計算の特徴を利用した解析など精

力的に進めておられるインドの理論化学者の中心的人物です。

IIT Kanpurはインド独立後、1960年代前半までに5校開校されたIITの一つであり、多くの理論研究者を抱えるインドの理論研究の拠点の一つです。IIT Kanpurのキャンパスは広大で、朝早くにはゲストハウスの中庭をクジャクが散歩しています（IIT Kanpurでは、'Birds of IIT Kanpur' という本を出しているほどです）。Chandra教授はIIT Kanpurの研究担当理事を務めてこられました。その任期が一旦終了するのを契機に分子研に滞在してもらえることとなりました。数十人のゲストを招待しても問題ない広い庭付きの家（官舎）に住んでおられるChandra教授が日本の住居環境をどう思われるか興味深いところです。

（斉藤 真司 記）



Chandra教授（左から二番目）とご家族。

も感動として伝わってきました。

人工クモ糸の素となるタンパク質の粉は糸だけでなく、フィルム、スポンジなど様々な形態に加工することが可能で、欲しい特性を持った材料を自由に作れるようになる可能性もあるとのことでした。現在はホテルや保育所を備えた巨大なバイオサイエンスパークの建設計画もあるそうで、所在地の鶴岡市にとっても喜ばしいお話だと思います。今回の講演では、タンパク質と遺伝子デザインの魅力だけでなく、目標に向けて何もないところから組織を作り上げていく様子にも惹きつけられました。参加された小学生からは「クモ糸でできた服は触り心地がいいですか？」との質問が出るなど市民の皆さんは興味津々で、講演終了後も菅原氏の前に並んだ長い列がなかなか捌けない様子でした。（木村 幸代 記）



科研費、特別研究員等の審査の公正性を保つ仕組み ——日本学術振興会学術システム研究センターの役割

学術システム研究センター（RCSS）は、総合科学技術会議の提言等を踏まえ、プログラムディレクター、プログラムオフィサーを擁する組織として、2003年に日本学術振興会に設置された。我が国の学術の振興のあり方を改善していくための検討のほか、それに必要な様々な現場の活動を行っている。研究現場に直結する最も重要な任務の一つが、科研費や学振特別研究員等の事業の審査員候補者を選考することである。

私は2013年度からこのセンターの化学専門調査班の専門研究員を拝命し、現在4年目でもうすぐ任期を終える予定である（本来3年任期だが、諸般の事情で例外的に1年間延長を命ぜられた）。この小文では、学振の事業の公正さがどのようにして担保されているか、特に、学振諸事業における審査員の選考の方法と、審査結果及びコメントの検証（審査員に対する評価）の仕組みを知って頂ければと思い、その業務の一端を紹介する。

RCSSの専門研究員の主な業務は、上述した科研費や特別研究員、及び学振が行う種々の国際事業等の審査員候補者の選考とその審査過程及び結果の検証、学振が主体となる顕彰事業における予備審査のほか、学術動向調査、事業の審査体制に関する提言、例えば最近では平成30年度の科研費から実施される分科細目等の体系の大幅な見直しにおける検討などがあった（科研費審査システム改革2018として公表済み）。学振の諸事業の企画などには直接

関与しない。

現在の科研費や特別研究員の審査においては、多くの種目で、書面による第一段審査と、その結果を受けての別な審査員による第二段審査で採択を決定している（平成30年度科研費の審査からこの方式が変わり、いくつかの種目で書面審査と合議審査を同一の審査員で行う方式、あるいはそれに類似の方式に移行する予定である）。書面審査では各申請に対して観点ごとの評価と総合評価を記すほか、コメントを記入することとなっている。このコメントが第二段の合議審査で重要な判定材料となる。そのため、書面審査員にはできるだけ詳細なコメントの記入をお願いしている。二段階の審査を行い、審査の段階により別な審査員が関わる種目では、特にコメントの重要性が高くなる。

さて、我々RCSS専門研究員の最も重要な業務の一つが、これらの事業（学振が審査主体を担っている事業に限る）の審査員の候補を選考し、また審査が適正に行われているかを客観的に検証することにある。審査員の選考は、全国の大学等の研究者が自ら登録した情報を基礎として、学振で各種情報を加えた審査員候補者データベースを利用して行う。審査員は2年連続してお願いする 경우가多く、毎年ほぼ半数を改選している。データベースによる候補者の選考は、必ず2名以上の専門研究員が合議して行い、選考担当者による偏りになるべく生じないように配慮されている。どの種目の申請に対しても

必ず書面及び合議ともに数名の審査員が審査するが、同じ研究分野（分科細目等）を審査する審査員には、同じ研究機関の研究者が複数選考されることはない。このような条件を満たす審査員候補者リスト（補欠候補を含む）を完成させると、センターの全体会議で確認後、学振の審査員選考会で承認され、各候補者に審査員への就任を依頼することになる。

各事業のその年の審査が終わると、書面審査員による審査が公正かつ適正に行われていたかどうかを、センター研究員が検証する。全ての申請に対する審査員による評価及びコメントをまとめた束を渡され、これを読んで確認する作業を行う。各審査員が全ての申請の審査を適正に完了しているか、評価分布に偏りがないかどうか等の単純な確認に留まらず、コメントの内容を読んで、定型化された短いコメントになっていて適正に内容の評価しているかどうか疑わしいものなどがなく、申請内容を公正に評価しているとはいえないものはないか、逆に内容に対して俯瞰的視野から公明正大かつ具体的な評価コメントを付しているか、などをチェックする。後者については、優れたコメントを付した審査員の中から表彰者を選考する際の資料としている。事業の審査には公正さが厳しく問われるが、それに反するような利益誘導や、競合研究等を不利に評価するような、利害関係に直接関わるような審査が行われていないかについても、専門研究員の知る範囲で調査している。審査員

は利害関係者（共同研究者、親類縁者等）の申請については自己申告して審査を辞退することが定められている。残念ながら、これに反して共同研究者等の申請に有利な評価をしていると疑われても仕方のない事例が、見つかることもある。これらの各審査員の評価・コメントに対する検証結果は、専門調査班全体の会議で確認の後、翌年以降の審査員候補の選考に適切に反映されるようなシステムとなっている。合議審査やヒアリングについても、RCSSの研究者が陪席し、適切に審査が進行しているかどうかを確認し、見届けている場合は、議論の最中にそれを指摘する場合もある。但し、審査結果に影響を及ぼす議論の内容に関しては、RCSSの研究者は一切意見を述べないことになっている（これは研究者として結構ストレスがたまることもある）。

以上が科研費等の審査の公正さを保つためのRCSSの役割の概要である。万全とは言えないまでも、公正さを維持、向上していくのに相当貢献してい

ることは確かであると思う。この任務を通じて、研究者の皆さんには次のような点に配慮していただきたいと考えるようになった。

- ・ 科研費等の審査員候補として登録し、また自ら登録した情報の更新を適宜行うこと。
- ・ 審査員の依頼があった場合は、特段の理由がない限り受諾すること。
- ・ 審査にあたっては、審査の手引きを熟読の上、公正な審査を行うこと。利害関係者である場合は、その旨申告し、利益誘導が疑われるような評価を決して行わないこと。
- ・ 一方、利害関係者を拡大解釈して、多数の申請の評価を辞退するようなことのないようにすること。（その申請に対する評価者の数が減少することになり、公正な選考を妨げる場合がある。）
- ・ 書面審査では申請内容を理解し、評価コメントには計画内容に対する評価を盛り込むこと。後の第二段審査で有効活用されることを意

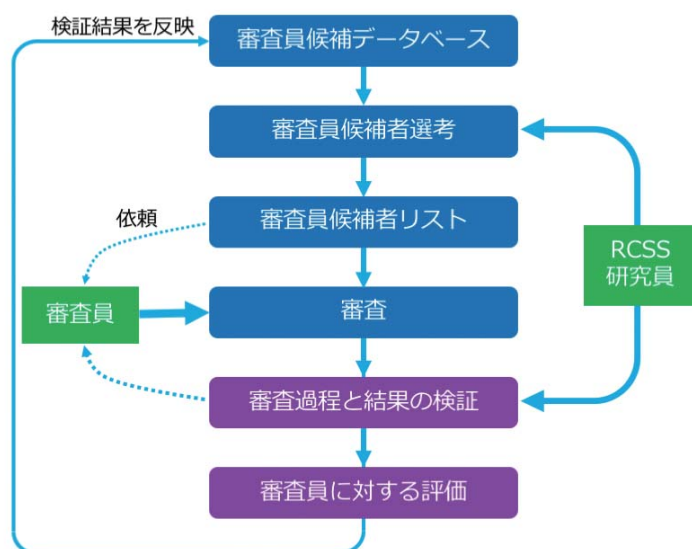
識したコメントを記すこと。

- ・ 科研費等の審査は、過去の業績で判断するのではなく、研究計画書で判断すること。過去の業績は、研究遂行能力の判断材料といえる。

審査の公正さを保つことは、科研費等の水準を維持、向上させるための大前提である。これが揺らぐことは、我が国の研究水準を維持できなくなることに直結する。また審査が公正かつ適正に行われていないと、「既得権化」という批判を浴びてしまう危険もある。各審査員が評価を適正に行うことが、やがては自分たちにはねかえってくるという意識をもって、審査にあたってもらえれば有り難いと思っている。

本原稿の執筆にあたって、RCSSの勝木元也副所長（元基生研所長）、化学専門調査班主任研究員の八島栄次教授（名古屋大）、君塚信夫教授（九州大）に多大なご協力を頂きましたことに感謝いたします。

（岡本 裕巳 記）



審査員選考と審査結果検証のスキーム

伊藤光男元分子研所長の絵画葵丘常設展開設

岡本 祐幸（名古屋大学大学院理学研究科 教授）

2016年11月27日（日）に伊藤光男元分子研所長の絵画の常設展が岡崎市の東岡崎駅の分子研側すぐの所にある「葵丘（ききゅう）」に開設されました。同日に葵丘で祝賀会が開かれましたが、川合眞紀分子研所長を初めとする分子研関係者、豊田泰陳自然科学研究機構岡崎生協店長、東北大伊藤研卒業生など30名の出席がありました。まず、小原淳葵丘館長が挨拶され、先代のお父様が岡崎市出身の画家荻太郎氏の作品を展示するために葵丘を建てられたが、荻さんもお自分の作品だけでなく、他の画家の作品も展示することを薦めていたこと、伊藤先生が分子研所長や岡崎国立共同研究機構長の時に、葵丘の顧問をされたこと、2001年には、葵丘で水彩画の個展を開かれたことなどの縁を話されました。次に、川合分子研所長が祝辞を述べられ、その中で、伊藤先生が分子研を去られる時に、助教授会から「名誉助教授」の称号を与えられたことを伺ったので、私も所長として、一つの目標ができましたと仰ったのが、印象的でした。中村宏樹元分子研所長の音頭で乾杯がされ、暫くの歓談の後に、福山秀敏東京理科大学教授・学長特別補佐が、東北大時代から伊藤先生の「応援団」をしています、2016年2月にも、築地市場で仕入れた魚介類を持って、伊藤先生宅で宴会を開きましたと仰いました。更に、岡田光司岡崎南ロータリークラブ会長が、伊藤先生が分子研所長や岡崎国立共同研究機構長だった時に、ロータリークラブが分子研訪問中の外国人の研究者とその家族のために、餅つき大会などを開いて交流を持ってきたこと、また、ブラザー印刷の専務取締役として、伊藤先生の画集の印刷をしてきたこと、伊藤先生の画集の前書きから、伊藤先生の奥様への追悼文を朗読され、先生が如何に奥様を愛されていたかという話をされました。次に、郷通子名古屋大学理事が伊藤先生が分子研所長時代にインドでの会議に分子研代表団に同行されたこと、伊藤先生の絵がお好きで、個展に何度か行かれたことなどを話されました。更に、小杉信博分子研教授が、伊藤先生が分子研所長時代に、年齢的には助教授とあまり変わらないのに、教授として重責を荷負わされたこと、50歳を過ぎたら趣味を持つようにと伊藤先生に言われていたのに、未だに趣味が持てていないので焦っているというようなことを言われました。最後に、分子研の杉山加余子さんの花束贈呈の後、伊藤先生がご挨拶をされて、楽しく和やかな雰囲気の中、祝賀会は終わりました。

常設展は、小原淳葵丘館長のご設計・ご提案の通りに用意されました。6枚の水彩画と伊藤先生のご略歴の額が展示されています。また、伊藤先生が出版された画集や画文集もその近くの机の上に置かれています。略歴額には、これまた小原館長のご提案で、伊藤先生ご夫妻の写真も入れられました。奥様もご一緒に写真にされたのは、伊藤先生の写生にいつも付き添われた奥様であり、先生がとても大切にされた方ですからとのこと。今回の展示はパリがテーマで、3ヶ月に1度ぐらいの頻度で伊藤先生が絵の差し替えに来られる予定だそうです。分子研の方々は勿論のこと、全国から分子研研究会などに来られる方は、ぜひ葵丘に立ち寄られて、伊藤先生の絵を鑑賞されることをお勧めします。最後に、何から何までお世話になった小原淳館長、江頭奈尾子さん初め葵丘の皆様と、常設展開設に向けて、いろいろとアドバイスしてくれた西川武志氏（私の分子研時代の博士研究員、現計算科学振興財団 FOCUS 主任研究員）にこの場を借りて感謝します。



コミュニティとコミュニケーション

前号より編集委員長を務めることになりました。「分子研レターズ」は分子研の機関誌兼活動報告誌であり、同窓会誌であり、コミュニティ誌です。私は分子研に来てまだ4年と少しですので、あまり分子研卒業生の皆さんやコミュニティの顔ぶれを存じ上げているわけではありませんが、前編集長からのご指名があったのは、これまでの経緯にあまりこだわらず、自由にこの会誌を発展させていって欲しいとのお気持ちからであると勝手に解釈させて頂いて、より皆さんに読んで頂ける内容の充実に私なりに努めていきたいと思います。

さて、私が分子研に来て最初に驚いたことのひとつに、コミュニティという言葉の使われ方があります。それまで自分はコミュニティに属して研究しているという意識はありませんでしたので、運営委員会などで「コミュニティ」が当然のように存在していて、その要請の元に分子研が活動している、という論理に少々違和感をいただきました。このようなロジックは、コミュニティに所属してない研究者（≒かつての自分）に対して排他的な雰囲気を持つような気もしましたし、こちらが定義するコミュニティと個々のメンバーが思っているコミュニティが異なる場面も十分想像されましたし、基本的には個人的な営みである自然科学研究の独自性・独立性を損なう言葉であるようにも聞こえたからです。その後、分子研設立時の経緯など、先人たちの多くのご苦勞があって分子研が設立されたことを知るようになり、また設立時から極めて学際的かつオープンな思想が共有されていたことが分かりましたので、前述の心配は、基本的には自分の勉強不足かつ杞憂であったことが判明しました。しかし同時に、その時感じた印象をすべて忘れてしまって良いものだろうか、という疑問が自分の中に残ったのもまた事実です。実際、少し話をしてみると、分子研の内外にも、最初の私の印象と似たような感想を持たれている方はいるようです。ですから、確かに大型プロジェクトの開始や大型施設の運営には研究者達の意見の集約が必要ですし、これまで分子研が行ってきた若手の育成という場面においては、所属PIのエゴイズムを超えた大きな視点での判断が必要となりますが、少なくとも個々人の研究という場面においては、コミュニティと研究者各人の距離の取り方・かかわり方は人それぞれ、場面ごとに変化してくるものなのでしょう。

Communityという言葉の語源を調べると、ラテン語で「共有」を意味する *Communis* から来ているそうで、同じ言葉から *Communicate* という動詞も派生しています。ですから語源から考えると、コミュニケーションという活動は、一方的な情報の伝達だけではなく、相手の意見も聞いて、やり取りをしながら情報・目的・価値観などを（場合によってはその違いも含めて）「共有」していく過程のことだと言えるでしょう。逆に考えると、Community とは、そのようなコミュニケーションが頻繁にあって初めて成立する共同体なのではないかと思います。ですから、コミュニティというものは、なかなか目に見えず不思議に思うこともありますし、「あって当然のもの」と考えることはやはり定義からしておかしい気がします。そういった疑問をはるかに吹き飛ばすだけの、構成員による活動・想い・努力によって、常に支えられ、維持されているものなのでしょう。また、コミュニティそのものには少し距離を置いていても、コミュニケーションには積極的に参加してくださる方もいるかもしれません。そして分子研レターズは、そのようなコミュニケーションの一部を構成している重要なコンポーネントの一つなのだと、改めて思っています。

最近、思いがけない場面で「レターズ読みましたよ」と声をかけて頂ける機会がたびたびあり、私のような新参者もコミュニティが確かにあることを感じられるようになってきました。「分子研レターズ」がこれからも皆さんのコミュニケーションを活発にする一助となるよう、精一杯努めていきたいと思います。紙面へのアイデア・ご意見・感想・ご希望などありましたら、どうぞお気軽にお寄せ下さい。

（山本 浩史 記）

On ne voit bien qu'avec le coeur. L'essentiel est invisible pour les yeux.

「大切なものは目に見えないのさ。心で見えないとね。」

“Le Petit Prince” Antoine de Saint-Exupéry



NEW STAFF

新人自己紹介

2016年7月1日着任

近藤 未菜子

こんどう・みなこ

協奏分子システム研究センター

階層分子システム解析研究部門 特別協力研究員



イーストアングリア大学で学位を取得後、ペンシルベニア州立大学博士研究員、日本学術振興会特別研究員、お茶の水女子大学特任講師を経て7月から特別協力研究員として古賀グループに勤務しております。これまでは励起状態の反応ダイナミクスの研究を行ってきました。今後は新たに生化学実験の手法を身につけ研究室へ貢献したいと思います。

どうぞよろしくお願い致します。

2016年8月1日着任

甲田 信一

こうだ・しんいち

理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門 助教



2015年4月より齊藤グループの博士研究員として分子研に所属しておりましたが、2016年8月より助教として改めて着任いたしました。自然現象に内在する階層性に関し、各階層の関係性、階層性由来の物性・機能の発現機構、また、その背後に潜む数理科学的構造に興味があります。現在は時計タンパク質の分子機構を研究しています。どうぞよろしくお願い致します。

2016年8月1日着任

川口 玄太

かわぐち・げんた

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 特任助教



2016年3月に京都大学博士後期課程を単位取得退学し、4月より山本グループの研究員としてお世話になっておりましたが、学位取得に伴い、8月より特任助教を務めさせていただきますこととなりました。有機強相関物質を用いたデバイスについて研究を行っています。どうぞよろしくお願い致します。

2016年8月1日着任

竹内 嵩

たけうち・たかし

理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門 特任研究員



日本大学で学位を取得後、日本大学理工学研究所研究員を経て、8月1日より信定グループの特任研究員として着任いたしました。これまでの研究では、電磁界と量子系の相互作用を対象とした複合物理解析コードの開発およびその応用を行ってまいりました。現在は量子系が生成する近接場について研究しております。

どうぞよろしくお願い致します。

2016年8月1日着任

小出 明広

こいで・あきひろ

物質分子科学研究領域

電子構造研究部門 特任研究員



平成27年度に千葉大学で日本学術振興会特別研究員(DC2)を経て学位を取得後、平成28年4月から7月まで日本学術振興会特別研究員(PD)として分子研の横山グループに所属し、8月から同グループの特任研究員として着任致しました。これまでは、X線吸収分光法における理論研究を行って来ましたが、現在は強磁性体や光触媒などのX線吸収スペクトルの解析に取り組んでいます。どうぞよろしくお願い致します。

2016年10月1日着任

MEISSNER, Matthias

光分子科学研究領域

光分子科学第三研究部門 IMSフェロー



I studied physics at the Friedrich Schiller University Jena, Germany, and received my doctoral degree (Dr. rer. nat.) in Jena in September 2016 for studies on the epitaxy of organic layers, including methodological improvements of the analysis of electron diffraction and scanning tunneling microscopy measurements. In October 2016 I joined the IMS as a research fellow with Prof. Dr. Satoshi Kera and aim at expanding my knowledge on the field of photoelectron spectroscopy on organic thin films.

2016年10月1日着任

後 藤 麻 子

ごとう・あさこ

研究力強化戦略室（国際研究協力課 併任）
特任専門員



製薬メーカーの研究所にて感染症薬の探索・開発研究に携わったのち、平成19年3月に学位（農学）を取得しました。国内外研究機関での研究員を経て、平成26年10月より特任専門員として国際研究協力課に勤務しております。本年10月より、研究力強化戦略室併任となりました。皆様の研究活動を応援したいという気持ちで、日々取り組んでおります。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

2016年10月12日着任

SUN Zhengyi

孫 正義

光分子科学研究領域
光分子科学第三研究部門 国際協力研究員



I received my Ph.D degree on condensed matter physics from Fudan University, China, in June 2011. After that, I went to Sweden and did the postdoctoral research in Linköping University. Since April 2015, I work in Nanjing Tech University. And in October 2016, I joined Prof. Kera's group as the visiting scholar. My research is centered on the surface science investigation on organic functional materials by photoelectron spectroscopy as well as their applications in organic electronics.

アウトリーチ活動

山本グループが指導協力した坂部 圭哉さん（海陽中等教育学校）が 第48回国際化学オリンピックで金メダルを受賞

この度、「第48回国際化学オリンピック・ジョージア大会」日本代表ヘッドメンター・前山勝也先生（山形大学）より依頼を受け、2016年6月からのべ5日間に渡り山本グループにて日本代表生徒の坂部圭哉さん（海陽中等教育学校5年）の実験指導を行いました。国際化学オリンピックとは、世界約60か国から200名以上の高校生が参加し、実験問題と理論問題によって化学の実力を競う大会です。成績優秀者には金メダル（参加者の1割）、銀メダル（同2割）、銅メダル（同3割）が授与されます。

日本代表高校生の指導ということでプレッシャーを感じつつも、日本で有数の実力を持つ高校生を指導できることへの楽しみを感じながら、実験指導を引き受けさせていただきました。出題される実験や理論問題は大学レベルから中には大学院レベルと思われるものも含まれており、非常にハイレベルなものです。前山先生からは事前に「生徒たちは高校では実験訓練がほとんどできず、例年、実験問題が日本代表の弱点になっています。」とのお話を伺いました。本番では、5時間で3種類の異なる実験問題が出題されるため、実験精度やデータの理解はもちろん、手際の良さやスピードも求められます。何よりも「実験慣れ」が大切になってくるだろうと感じましたので、本番を想定し、複数の実験を同時に行いながらのトレーニングを何度も繰り返して行いました。わずか5日間の指導ではありましたが、実験技術はみるみる上達していき、高校生の吸収力の高さに大変驚かされました。

迎えた7月の本大会、坂部さんは見事、金メダルを受賞しました。坂部さんの能力の高さは指導を通じて十分すぎるほど感じていましたので驚くことはありませんでしたが、世界中からトップの高校生が集まる中、高校2年生での金メダル獲得は快挙だと思います。本当におめでとうございます。坂部さんは、来年度に行われる「第49回・タイ大会」の日本代表候補にも選ばれていると聞いています。2年連続の金メダル獲得へ向けて、来年度も最大限の協力が出来ればと思っています。

（須田 理行 記）



共同利用研究ハイライト

X線小角散乱法による味覚受容体リガンド結合ドメインの味物質結合に伴う構造変化の解析

山下 敦子 岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 教授

1. はじめに

味覚受容は、口腔内の味覚受容細胞膜上に存在する味覚受容体が、食物に含まれる化学物質を感知し、その情報を生体内に伝達することで始まる。味覚受容体のうち、主に栄養素となる化学物質の感知を担う受容体は、T1rと呼ばれるタンパク質で構成されている。私たちヒトでは、T1r1とT1r3のヘテロ二量体がグルタミン酸などによるうま味受容、T1r2とT1r3のヘテロ二量体が糖などによる甘味受容を担っている^[1]。

「私たちはどのように味を感じているのか？」を理解する上では、「味覚受容体はどのように味物質を認識し、その情報を生体内に伝えているのか」を分子レベルで知ることが第一歩となる。一方、T1rは、発現・精製が極めて困難で、味物質結合やそれに伴い起こる受容体の変化を解析するには欠かせない精製タンパク質試料が得られておら

ず、分子解析は途上にあった。

2. T1r2a/T1r3リガンド結合ドメインヘテロ二量体試料と味物質結合

T1r受容体では、細胞外に存在し、約500アミノ酸残基からなるリガンド結合ドメイン（LBD）が、味物質結合とその後の受容体変化の起点を担う（図1）。そこで筆者らは、LBDに焦点をあて、複数の候補の中から、発現タンパク質が適切な局在と折りたたみ性を示すものをスクリーニングする戦略を取ることにした。マウスやヒト由来のものはじめ、ほとんどのT1rLBDは、残念ながら発現時に適切に折りたたみられず、細胞外に移行しない結果が得られた^[2]。一方、スクリーニングしたさまざまな種由来T1rの中で、メダカ由来のT1r2aとT1r3のLBDが、適切な折りたたみと細胞外への移行を示すことを見出し、機能単位であるヘテロ二量体として発現・精製することに成功し

た^[3]。

メダカT1r2a/T1r3受容体は、種々のL-アミノ酸に応答を示すことが報告されていた^[4]。そこで、これらのアミノ酸がT1r2a/T1r3LBDに結合するかどうかを、等温滴定カロリーメトリーで測定した。その結果、受容体応答を引き起こすグルタミンやアラニンは、それぞれ数 μM ~数十 μM の濃度域で、実際にT1rLBDに結合を示すことが明らかとなった。さらに、それぞれのサブユニットに蛍光タンパク質を融合し、蛍光共鳴エネルギー移動（FRET）解析を行ったところ、同じ濃度域のアミノ酸の添加により、FRET効率の変化が起こったことから、T1rLBDが、味物質であるアミノ酸の結合により、何らかの構造変化を示すことがわかった^[3]。

3. T1r2a/T1r3リガンド結合ドメインヘテロ二量体の味物質結合に伴う構造変化

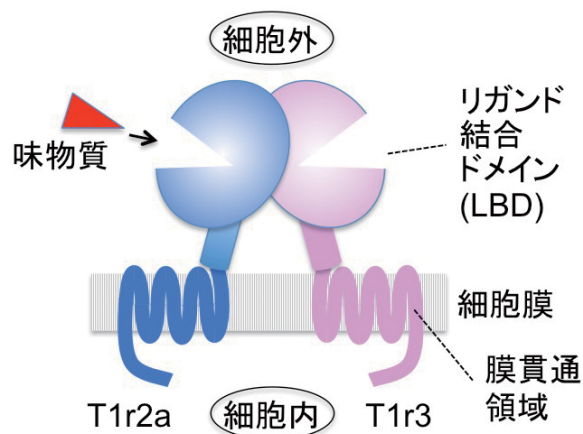
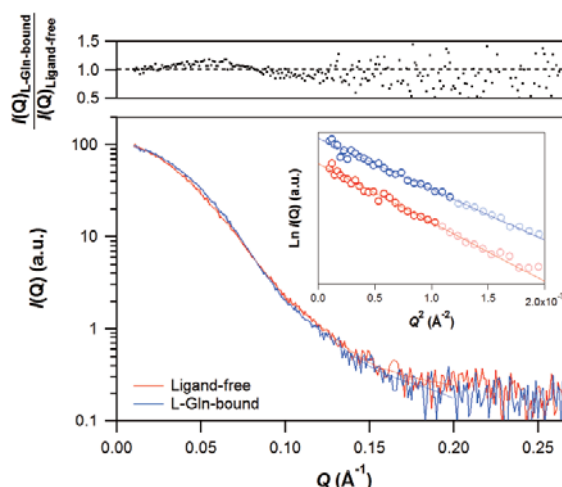


図1 味覚受容体T1rの概略図。

図2 T1r2a/T1r3リガンド結合ドメインヘテロ二量体のX線散乱曲線とギニエプロット（挿入図）^[3]。赤色と青色がそれぞれ味物質非存在下および存在下での散乱曲線を示す。

では、味物質結合は、どのような構造変化をT1rLBDにもたらすのだろうか？筆者らは、分子研のX線溶液散乱装置iMSaxsを利用し、T1r2a/T1r3LBD溶液のX線小角散乱実験を行った。その結果、(1) 散乱曲線のギニエプロットから、T1r2a/T1r3LBD分子の慣性半径は、味物質（グルタミン）非存在下（ $39.8 \pm 0.6 \text{ \AA}$ ）とくらべ、味物質存在下では小さくなる（ $37.0 \pm 0.5 \text{ \AA}$ ）こと（図2）、(2) 散乱曲線から算出した距離分布関数から、分子の最大長も、味物質非存在下（ $143 \text{ \AA}$ ）とくらべ、存在下では小さくなる（ $112 \text{ \AA}$ ）ことが判明した^[3]。これらの結果は、味物質の結合に伴い、T1rLBDが、広がった構造からコンパクトな構造に変化することを示している（図3）。これまでに報告されている類似受容体の立体構造から算出した結果と比較すると、T1r2a/T1r3LBDは、二量体相互作用様式の変化に匹敵する、比較的大きな構造変化を示していることが明らかとなった。細胞外にあるLBDのこの構造変化が、味物質結合によって起こる味覚受容の初反応となり、受容体の膜貫通領域に伝達され、結果として細胞内情報伝達タンパク質の活性化を引き起

こしていると推測される。

5. おわりに

本研究は、日々体感する生体反応ながら、分子レベルでのメカニズム解明が遅れていた味覚受容について、分子研のサポートにより、初めて分子レベル解析の俎上にのせることができたものと考えている。この成果を基盤に、さらなる研究の発展を目指している。

本研究は、分子研・秋山修志教授との共同研究として、協力研究（ナノテクノロジープラットフォーム）の枠組みで実施した。秋山教授には、iMSaxs

を利用した夜を徹したデータ収集から、解析に至るまで、懇切丁寧なご支援をいただいた。初挑戦の解析法に不慣れだった筆者にとって、この協力研究がなければ、研究をまとめるのに困難を増していただろうと思うと、感謝の念でいっぱいである。新しい実験系の導入は、少々ハードルがあるが、研究を前に進める重要な転換点となることが多い。そのハードルを下げ着実な結果が出るようサポートいただける、このような支援制度の継続と発展を、心より願っている。

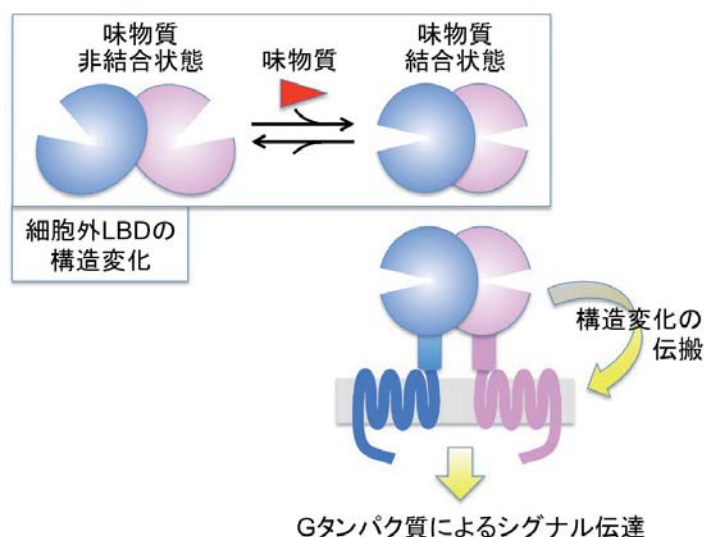


図3 今回の結果より推測された味覚受容体T1rLBDの構造変化と受容体シグナル伝達のメカニズム。

参考文献

- [1] Yarmolinsky *et al.* *Cell* **139**, 234 (2009).
- [2] Ashikawa *et al.* *Prot. Sci.* **20**, 1720 (2011).
- [3] Nango *et al.* *Sci. Rep.* **6**, 25745 (2016).
- [4] Oike *et al.* *J. Neurosci.* **27**, 5584 (2007).



やました・あつこ

1998年京都大学大学院農学研究科農芸化学専攻博士後期課程修了、博士（農学）。理化学研究所基礎科学特別研究員、同研究員、コロンビア大学博士研究員、理化学研究所放射光科学総合研究センターチームリーダーなどを経て2012年6月より現職。専門は構造生物学。

共同利用研究ハイライト

腸管出血性大腸菌感染症の治療薬開発のための
in silico 研究

尾又 一実 国立国際医療研究センター 数理疫学研究室室長

1. 流行が続く腸管出血性大腸菌感染症

本邦における腸管出血性大腸菌 *Enterohemorrhagic Escherichia coli* (EHEC) 感染報告数は、1996年の大流行以降も年間約4,000人前後で推移しており(図1(a))^[1]、有効な薬剤がいまだ開発されていないことを考えると、この傾向が今後も続くという可能性は大きい。EHEC感染症は症状に大きな幅があり、全く症状がないもの、軽い腹痛や下痢のみで終わるものから、およそ3～8日の潜伏期において頻回の水様便、激しい腹痛、著しい血便、さらにはこれら有症者の6～7%が、溶血性尿毒症症候群(HUS)や脳症などの重篤な合併症を起こし、ときには死に至るものまである^[2]。

EHEC感染症が認知されたのは、1982年、アメリカ・オレゴン州とミシガン州でハンバーガーによる集団食中毒事件があり、患者の糞便からO157が原因菌として見つかったのが最初で^[1,2,3]、それ以前はその存在が知られていなかった。本邦では、1984年に大阪府で、2才と5才の兄弟が腹痛と水様性下痢を

発症し、血性下痢になったのが最初の報告であろう。当時はまだEHECの認知度が低かったので、詳しい検査は実施されず、原因不明の下痢症として処理されたが、翌年、保存されていた弟の糞便からO157が検出された^[3]。

2. 志賀毒素とその阻害分子

EHEC感染症の病原分子は、EHECが産生する志賀毒素(ヴェロ毒素ともいう)である。EHECの血清型は、菌の表面にあるO抗原(細胞壁由来)とH抗原(ぺん毛由来)により細かく分類されており^[2]、代表的な血清型にO157:H7がある(図1(b))。EHECは、血清型によって、志賀毒素を産生するものとしらないものがある。

志賀毒素(Stx)は、Aサブユニット(StxA)とBサブユニット(StxB)からなる。StxBは標的細胞膜上の中性糖脂質であるグロボトリアオシルセラミド(Gb3)の糖鎖部を特異的に認識し、これによりStxはエンドサイトーシスで細胞内に侵入する。StxAは侵入後の細胞内での毒素活性を担う^[4]。本研究

で着目するStxBは5量体タンパク質である(図2a)。Stxには2種類のファミリー、Stx1、Stx2があり、StxBの残基数は1量体あたりそれぞれ69個と70個、合計で345個と350個である。StxBの形状は平面的で、明らかな結合ポケットを持たない。結合サイトは1量体あたり3箇所あることが知られており^[4,5]、合計15個が、表面上に分布している(図2a)。

西川喜代孝の研究グループは、これまでに多くのStxB阻害分子を考案してきたが^[4,6,7]、最近、ペプチド・ライブラリー法を利用して、Stx1B、Stx2B双方に強く結合するリガンド、MMAtetを開発した^[7]。このリガンドは、彼らが長年研究を続けている、“腕”のある(多価の)ペプチド・オリゴマーの一つで、腕(ライブラリー部分)の数は4本、各腕のアミノ酸配列(モチーフ)は、MAMMARRRRRAである(図2b)。この大きさは、StxBの表面をほぼ覆う大きさである。

StxBは、単独^[8]もしくはGb3やその他の分子との複合体^[5,9,10,11]はX線解

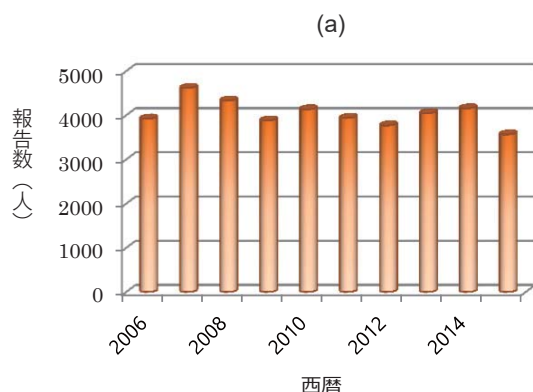


図1 (a)国内の2006-2015の期間の腸管出血性大腸菌感染症報告数。(b)腸管出血性大腸菌O157:H7の電子顕微鏡写真
(国立感染症研究所 <http://www.nih.go.jp/niid/ja/ehec-m/2055-bac1/related/710-ehec-o157sem.html>)。

析によって結晶構造が明らかにされているが、西川らのペプチド性阻害薬との複合体は現在のところ結晶化に成功していないため、その静的な構造さえ不明である。そこで、本研究では、分子動力学 (MD) シミュレーションの方法により、Stx1 の B サブユニット (Stx1B) と MMAtet の結合を詳しく検討することにした。

3. In silico 研究の方法

MD シミュレーションは、高速計算プログラム Generalized-Ensemble Molecular Biophysics (GEMB、奥村久士准教授 (分子研) による開発)^[12] を使って行った。このプログラムは、腕を持つ樹状分子を扱うことができる。Stx1B の初期構造は、PDB コード 1BOS を用いた。水分子は約 2 万個が必要と見積もられ、力場は、StxB と MMAtet には AMBER99SB を、水分子には TIP3P を用いた。

4. 計算結果

MMAtet のライブラリー部分 1 本単独を Stx1B に結合させた場合、Stx1B の結合サイトにある酸性アミノ酸 (アスパラギン酸、グルタミン酸) に、リガンドの塩基性アミノ酸 (アルギニン) が引き寄せられるように結合した。単独のライブラリー部分 4 本を Stx1B に結合させた場合は、一つの例として、2 本のペプチドは Stx1B の表側に結合したが、他の 2 本は裏側と側面に結合する、といった結果が得られた。ただし、Stx1B の裏側には Stx1A があるので、裏側への結合ということは現実にはあり得ない。この計算結果は、4 本は同じものであるから同じ電荷をもって、相互に斥力が働いたことを示していると考えられる。このことは、西川らの生物学実験で、ライブラリー単

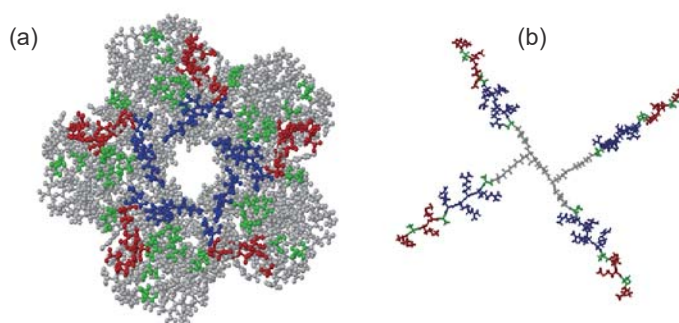


図2 (a) Stx1B と (b) MMAtet の構造。Stx1B の 3 種類の結合サイトの原子を赤、緑、青で示す。MMAtet は、M (メチオニン)、A (アラニン)、R (アルギニン) の原子をそれぞれ赤、緑、青で示す。

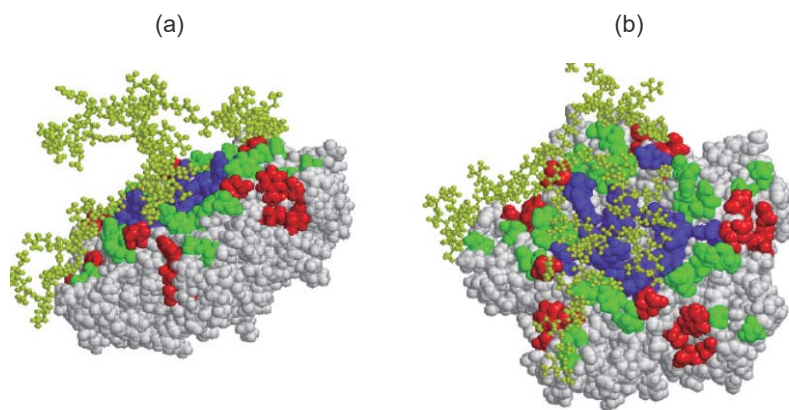


図3 時間 10ns(a)、150ns(b)における、Stx1B-MMAtet 複合体の構造。Stx1B、MMA-tet はそれぞれ、space-fill、黄色の ball-and-stick で示した。赤、青、緑は Stx1B の 3 種類の結合サイトを表す。

量体の場合は、StxB の結合サイトに対する結合モチーフがまったく得られなかったという事実^[4]と符合している。

ペプチド・ライブラリー 4 本を結合して 4 量体を作り (MMAtet)、Stx1B に結合させた場合、各ライブラリー部分は、上記の場合のように分散することなく、Stx1B の表側に結合した (図3)。Stx2B についても MD シミュレーションを行った結果、同様の結合が見られた。Stx1B-MMAtet 複合体のスナップショットを図3に示す。時間 10ns で (図3a)、十分結合していなかったリガンドの一部は、150ns では (図3b)、Stx1 との距離がかなり小さくなった。

Stx1B と MMAtet の結合を定量的に検討するために、MMAtet のアミノ酸残基 i と Stx1B のアミノ酸残基 k の重心間の距離 d_{ik} を計算し、結合スコア S_{ik}

を $S_{ik} = 1/d_{ik}$ と定義した。図4aに、結合スコアの等高線のスナップショットを示す。腕の一つ Arm1 は Stx1B 全体に広がって結合しているが、他の腕は Stx1B 上の偏った領域に結合していることがわかる。たとえば、Arm4 は、Stx1B の 5 量体の内、図の下部のバーの一番左に示した単量体との結合スコアが高い。

Stx1B の 5 量体の各単量体、および MMAtet の各腕は、同じアミノ酸配列なので、双方について結合スコアの和をとって集約すると、図4bのような等高線が得られる。スコアの高い領域が、3 ~ 4 か所あるのがわかり、これらはいずれも縦帯状になっていて、MMAtet が、Stx1B の限られたアミノ酸残基に選択的に結合していることを示している。この選択性は、他のサンプルにつ

いても見られ、かつ、選択部分はほぼ同じであった。

どのアミノ酸が強く結合しているかを見るために、スコアの高い結合について検討した。Arm1では、Stx1BのW34、N35、D18、がスコアの高いアミノ酸で、Arm2-4では、N55、H58、G61、G62、が多く見られた。西川らの最近のミュレーション実験では、D17、D18、F30、W34、G62、が着目され、これらをグルタミン酸、アラニンなどに置換すると、結合度が著しく低下することが示されている^[7]。したがって、本研究の結果は、実験結果との良好な一致を示していると考え

ことができ、現実のStxB-MMAtet結合を反映しているであろうと推論される。また、ミュレーション実験で着目されていないアミノ酸が、シミュレーションでは結合に寄与していると思えることがあるが(N55、H58など)、以前の研究で^[6]、簡単なMDシミュレーションにより、StxBのいくつかの残基

がリガンドの結合に寄与していることが示唆され、生物学実験に採用された。これらのことから、本研究のMDシミュレーションは、EHEC感染症に関する生物学実験および薬剤の開発において、重要な役割を担っているといえる。

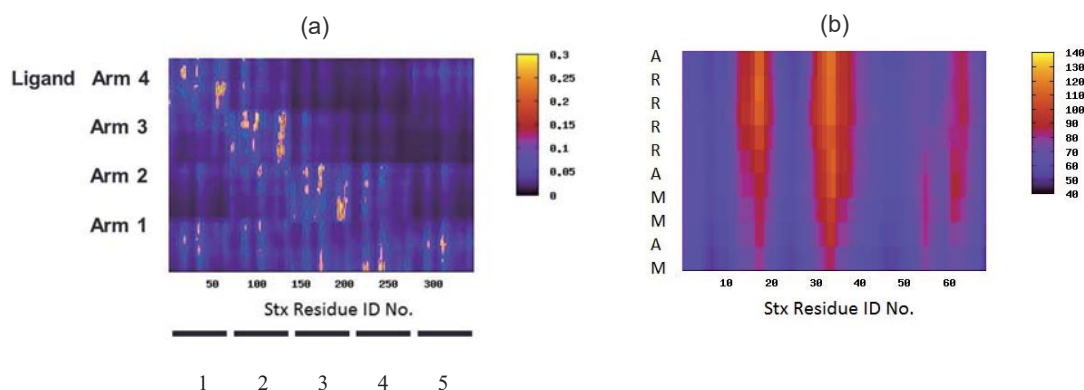
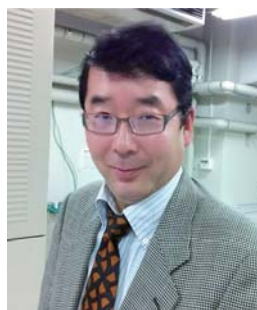


図4 (a) 結合スコア S_{ik} の等高線のスナップショット。縦軸はMMAtet(リガンド)の各腕の識別番号、横軸は志賀毒素のアミノ酸残基 k の識別番号で、下のバーは5量体の各単量体を示す。MMAtetのアミノ酸配列は、各腕について下からMAMMARRRRA。(b) Stx1Bの5量体の各単量体およびMMAtetの各腕について和をとった結合スコアの等高線。時間140-150ns。縦軸はMMAtetのアミノ酸配列、横軸はStx1Bのアミノ酸残基の識別番号で、各単量体のアミノ酸識別番号は、1番目の単量体の番号1~69に集約した。

参考文献

- [1] 国立感染症研究所, *IASR* **37**, 85-86 (2016).
- [2] 厚生労働省, http://www1.mhlw.go.jp/o-157/o157q_a.
- [3] 大阪府立公衆衛生研究所, 公衛研ニュース **No.1** (1997).
- [4] 西川喜代孝, 志賀毒素の細胞内輸送を誘導するペプチド, *蛋白質 核酸 酵素* **53**, 44-51 (2008).
- [5] H. Ling et al., Structure of the Shiga-like Toxin I B-Pentamer Complexed with an Analogue of Its Receptor Gb3. *Biochemistry* **37**, 1777-88 (1998).
- [6] K. Nishikawa, M. Watanabe, E. Kita, K. Igai, K. Omata, M.B. Yaffe, and Y. Natori, A multivalent peptide library approach identifies a novel Shiga toxin inhibitor that induces aberrant cellular transport of the toxin, *The FASEB Journal*, **20**: 2597-9, 2006.
- [7] K. Tsutsuki, M. Watanabe-Takahashi, Y. Takenaka, E. Kita, and K. Nishikawa, Identification of a Peptide-Based Neutralizer That Potently Inhibits Both Shiga Toxins 1 and 2 by Targeting Specific Receptor-Binding Regions, *Infect. Immun.* **81**, 2133-2138 (2013).
- [8] M.E. Fraser et al., Structure of Shiga Toxin Type 2 (Stx2) from *Escherichia coli* O157:H7, *J. Biol. Chem.* **279**, 27511-27517 (2004).
- [9] P.I. Kitov et al., Shiga-like toxins are neutralized by tailored multivalent carbohydrate ligands, *Nature* **403**, 669-672 (2000).
- [10] J.M. Jacobson et al., The crystal structure of Shiga toxin type 2 with bound disaccharide guides the design of a heterobifunctional toxin inhibitor, *The J. Biol. Chem.* **289**, 885-894 (2014).
- [11] M.E. Fraser et al., Binding of adenine to Stx2, the protein toxin from *Escherichia coli* O157:H7, *Acta Cryst.* **F62**, 627-630 (2006).
- [12] H. Okumura, Temperature and pressure denaturation of chignolin: Folding and unfolding simulation by multibaric-multithermal molecular dynamics method, *Proteins*, **80**: 2397-2416, 2012.



おまた・かずみ

1988年慶應義塾大学理工学部物理学科卒、
1999年同大学院博士課程修了、同大学助手。
この間、東京工業大学、日本IBMに在籍。
2001年より現職、
2002~2004年コペンハーゲン大学エルステッド
研究所研究員。
専門：計算医学。
趣味：ゴルフ、禅の文化の探求、動植物の飼育、音楽。

1. はじめに

金属錯体は、電子状態の多様な金属イオンと、設計性に富んだ有機配位子で構成され、2つをうまく組み合わせ、規則的に配列された集積型金属錯体は、無機物や有機物を超える物性や機能が期待されている。中でも、d軌道に不対電子を有する常磁性金属を、(金属) – (配位子) – (金属) と繋げ、配位子の π 軌道を介した磁気的相互作用に関する研究が精力的に進められてきた。一方で、常磁性金属を(金属) – (異種金属) – (金属) と繋げ、異種金属のd軌道を介して磁気物性の発現を狙った研究はあるだろうか？ 我々は、複数種類の金属を、直接の金属結合で規則的に一次元状に並べることに成功しており^[1] (図1)、並んだ金属の中には常磁性種もある。金属結合で一列に並んだ一次元鎖錯体には、古くはKCPやマグナス塩が、近年ではロジウムや白金などの平面性d8金属が一次元集積化したものが報告されているが、導電物性に関する

研究がメインであり、化合物の種類も少ない。本稿では、2種類の金属錯体のフロンティア軌道を考慮した異種金属一次元鎖錯体の合成法と特徴を紹介するとともに、常磁性化した最近の結果を述べたい。

2. 異種金属一次元鎖錯体の特徴と常磁性化

図1に示すような金属の並びを有する異種金属一次元鎖錯体は、主に複核錯体で構成されている。一般に、金属結合をもつ複核錯体の分子軌道は、双方の d_{z^2} 軌道から σ と σ^* 軌道、 d_{yz} もしくは d_{zx} 軌道から縮重した π と π^* 軌道、 d_{xy} 軌道からの δ と δ^* 軌道を用いて表せる。一次元鎖はz方向に伸長化するので、 σ 性軌道のHOMO-LUMO相互作用を利用すれば、複核錯体同士を上手に繋げられるはずである。例えば、 $[\text{Pt}_2(\text{piam})_2(\text{NH}_3)_4]\text{X}_2$ ($\text{piam} = \text{pivalamidate}$, $\text{X} = \text{アニオン}$) の金属酸化数は $\text{Pt}_2^{\text{II,II}}$ で σ^* 軌道にHOMOをもち、

$[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCF}_3)_4]$ は $\text{Rh}_2^{\text{II,II}}$ で σ^* 軌道にLUMOをもつ。この2つを混合すると緑色単結晶(1)が得られ、 $[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCF}_3)_4]$ は2つの $[\text{Pt}_2(\text{piam})_2(\text{NH}_3)_4]$ によりサンドイッチされ、 $-\text{Pt}-\text{Pt}-\text{Rh}-\text{Rh}-\text{Pt}-\text{Pt}-$ と並んだ一次元鎖を生成する^[2] (図2a)。1はz方向に繋がることで、 σ 性軌道による価電子帯(VB)と伝導帯(CB)を形成し、このバンド間に $[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCF}_3)_4]$ の π^* 軌道が挿入した電子構造をとる。1の拡散反射スペクトルは、この電子構造を反映し、VBからCBへの遷移に相当する E_1 (2.67、2.23 eV) と、挿入した π^* 軌道からCBへの遷移による E_2 (1.85 eV) と E_3 (1.55 eV) がみられる。

$[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCF}_3)_4]$ の替わりに、 $[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4]$ または $[\text{Rh}_2(\text{NHCOCH}_3)_4]$ を用いても、同様に $-\text{Pt}-\text{Pt}-\text{Rh}-\text{Rh}-\text{Pt}-\text{Pt}-$ と並んだ一次元鎖錯体の2と3が得られる^[2,3] (図2bと2c)。拡散反射スペクトルも、1と同様に、3つの E_1 、 E_2 、 E_3 の吸収がみら

異種金属一次元鎖錯体

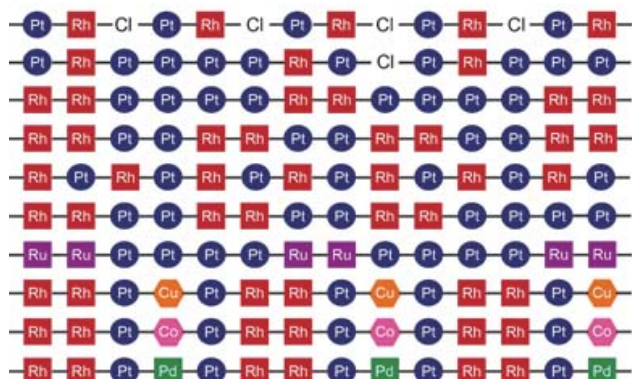


図1 我々が得ている異種金属一次元鎖錯体中の金属の並び方。

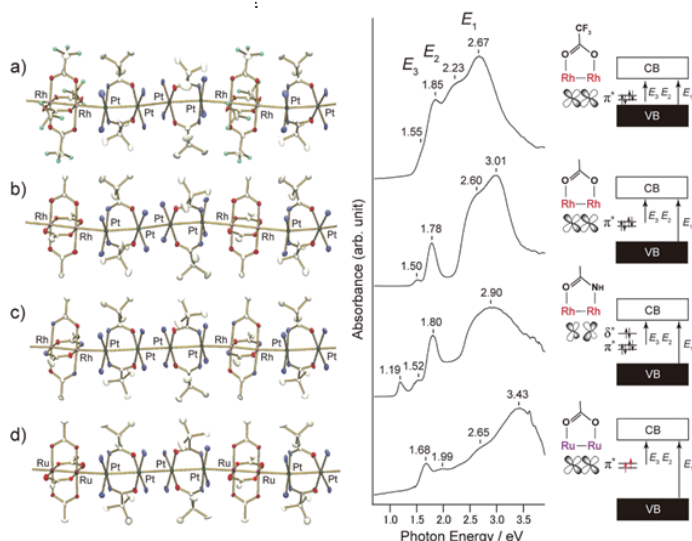


図2 a) 1、b) 2、c) 3、d) 4の一次元構造、拡散反射スペクトルおよび簡易的な電子構造。

れるが、 E_1 が**1**と比べ0.3 eVほど大きく、バンドギャップが広がっていることがわかる。また、**3**では架橋配位子のアミド基の π 供与のため、 δ^* 軌道がHOMOと考えられる。すなわち、**1–3**は同じ金属の並びをもつにも関わらず、電子構造が大きく異なっている。

$[\text{Ru}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4]$ は縮重した π^* 軌道に2つの不対電子を有するため常磁性であり、 $[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4]$ と同様、 σ^* 軌道にLUMOをもつ。 $[\text{Ru}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4]$ と $[\text{Pt}_2(\text{pam})_2(\text{NH}_3)_4]\text{X}_2$ を混合すると、茶色単結晶(**4**)が得られた。単結晶X線構造解析の結果、 $-\text{Pt}-\text{Pt}-\text{Ru}-\text{Ru}-\text{Pt}-\text{Pt}-$ と並んだ一次元鎖錯体であり、**2**と比較すると、**4**はRhをRuに変えただけの構造であった^[4](図2d)。拡散反射スペクトルでは、 E_1 が3.43 eVと、バンドギャップが広がっていた。

図3には、**4**の磁化率測定の結果を示すが、300 Kの χT 値が0.95

$\text{cm}^3\text{Kmol}^{-1}$ と、 $-\text{Pt}-\text{Pt}-\text{Ru}-\text{Ru}-\text{Pt}-\text{Pt}-$ あたり2つの不対電子に相当し、 $[\text{Ru}_2]$ の縮重した π^* 軌道に2つの不対電子があることがわかった。すなわち、Ru上の不対電子は消失せず、常磁性種を金属結合で一次元鎖化することに成功した。 χT 値は低温になるにつれて減少し、2 Kで $0.07 \text{ cm}^3\text{Kmol}^{-1}$ になったが、この減少は $[\text{Ru}_2]$ 内でのゼロ磁場分裂による寄与が大きく、フィッティングの結果、隣接 $[\text{Ru}_2]$ との反強磁性的相互作用の大きさは -1.4 cm^{-1} と、弱いことがわかった。この交換相互作用の小ささは、不対電子のあるd軌道が、隣接金属のd軌道と空間的に重なり合っていないためと考えられ、今後の課題となっている。

3. おわりに

2種類の金属錯体のフロンティア軌道を考慮すれば、常磁性の金属同士を金

属結合で繋げることができ、通常、単一種では並べない種類の金属を一次元状に並べることが可能である。まだまだ面白い物性は出ていないが、岐阜で新しい常磁性一次元鎖錯体を合成し、岡崎で興味深い磁気物性を見出そうと、日々奮闘中である。本研究は、ナノテクノロジープラットフォーム共同利用の支援を受けて遂行されました。著者の所属する大学では極低温で磁気物性を測定できず、よく整備されたSQUID型磁化測定装置(Quantum Design MPMS-7)を分子研で使用できることは大変ありがたく感謝する次第です。この共同利用は、管理と維持が大変な大型装置を利用できるだけでなく、旅費のサポートまで受けられる大変嬉しいシステムで、今後とも是非継続して頂きたいと願っています。

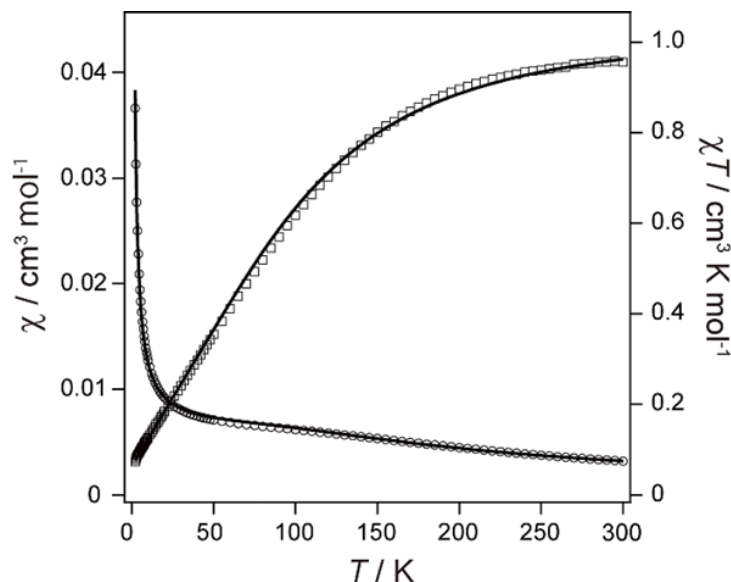


図3 **4**の2–300 Kの磁化率測定：○は χ 、□は χT 、実線はフィッティングの結果。



うえむら・かずひろ

1999年京都大学工学部工業化学科卒業。2004年京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻博士後期課程修了。2004年早稲田大学大学院理工学研究科 客員研究助手。2006年山口大学大学院理工学研究科助手。2009年岐阜大学工学部助教。2014年より現職。

専門：金属錯体化学

趣味：野菜作り

参考文献

- [1] 植村 一広, セラミックス, **2016**, 51, 748–751.
- [2] K. Uemura, M. Ebihara, *Inorg. Chem.*, **2011**, 50, 7919–7921.
- [3] K. Uemura, T. Kanbara, M. Ebihara, *Inorg. Chem.*, **2014**, 53, 4621–4628.
- [4] K. Uemura, N. Uesugi, A. Matsuyama, M. Ebihara, H. Yoshikawa, K. Awaga, *Inorg. Chem.*, **2016**, 55, 7003–7011.

「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」の開催報告

水野 雄太 東京大学大学院総合文化研究科 博士課程2年

1. はじめに

「分子科学若手の会」は、実験・理論・計算を問わず分子科学に関心を持つ若手研究者の交流と勉学の機会を設け、分子科学全体の研究活動の推進と発展に寄与することを目的として活動する団体である。弊会では、全国から若手研究者が集まる勉強会である分子科学若手の会夏の学校（以下、夏の学校）を年に一回開催し、さらに各地方に置かれた支部局が勉強・交流企画を数か月ごとに地方単位で開催しており、近年は隣接他分野の若手の会との

合同企画も盛んに行っている。

2016年度の夏の学校は、1961年の初開催から数えて56回目にあたり、先駆的な研究を推進されている研究者の方々を講師としてお招きし、全国から若手参加者を募り、先生方の講義・講演と参加者同士の議論・情報交換の場を提供することを目的として8月に京都で開催された。夏の学校開催にあたり、分子科学研究所の平成28年度共同利用研究（前期）「若手研究会等」の支援のもと、「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」を夏の学校

の事前準備として行い、そこでの議論・意見交換の成果は夏の学校の企画運営に大いに反映された。

本稿では、「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」と「第56回分子科学若手の会夏の学校」について報告する。

2. 第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会

6月26日に分子科学研究所にて行われた講義内容検討会では、夏の学校での講義（分科会）を引き受けていただ



写真1 分科会の様子（第1分科会）。



写真2 分科会の様子（第2分科会）。



写真3 全体講演の様子。
（第4分科会 城田先生のご講演）

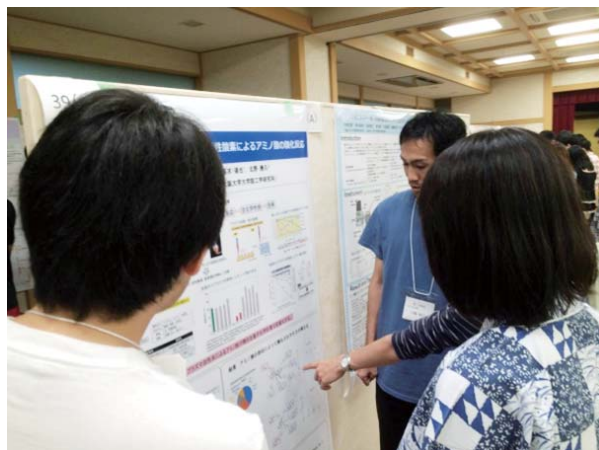


写真4 ポスターセッションの様子。

いた5名の講師の方々と弊社役員により、分科会の内容とテキストの詳細を検討した。また、弊会の役員会議を同時に開催し、夏の学校当日の各種企画の打ち合わせ、会の現在の運営状況や今後の方針についての議論を行った。

3. 第56回分子科学若手の会夏の学校

2016年度の夏の学校は、8月22日-26日に京都大学吉田キャンパス北部構内（分科会・講演会場）と聖護院御殿荘（各種企画・宿泊会場）において開催した。講師を除く参加者は79名であった。

【特別講演】

夏の学校の冒頭で、高塚和夫先生（京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー、東京大学名誉教授）に分子科学の歴史と展望をご自身の研究来歴を含めご講演いただき、若手研究者に対する熱いメッセージをいただいた。

【分科会・全体講演】

参加者は以下の5つの分科会に分かれて、それぞれ4日間の集中講義を受けた。また、先生方が取り組まれている最先端の研究について全参加者の前

でご講演いただいた。

1. 高柳 敏幸 先生（埼玉大学 教授）
「量子衝突論の基礎と化学反応動力学への応用」
2. 石崎 章仁 先生（分子科学研究所 教授）
「凝縮相化学動力学の理論 — 光学応答と量子力学 —」
3. 大下 慶次郎 先生（東北大学 助教）
「イオン移動度分析法を中心とした気相分光実験」
4. 城田 秀明 先生（千葉大学 准教授）
「液体・溶液の分子間ダイナミクス：低振動数領域の分光手法とスペクトルの解釈」
5. 清野 淳司 先生（早稲田大学 次席研究員）
「相対論的電子論」

【質問コーナー】

前年度に引き続き、分科会講師の先生方に、キャリアパスや海外留学、普段の勉強の仕方などについて参加者から寄せられた質問に回答していただく場を設け、参加者にとって有意義な情報獲得の場となった。

【ポスターセッション】

参加者によるポスターセッションでは、4晩にわたり51件の発表が行われ

た。全国から集まった様々な分野の参加者による活発な議論が行われ、分野の垣根を越えた学术交流の場となった。

【研究交流会・自由集会】

参加者同士の交流を促進する企画として、少人数グループ内で自己紹介や自身の研究紹介をする自己紹介・研究交流会、テーマごとにグループに分かれて参加者同士で自由に議論する自由集会を企画した。これらの企画は今年が初の試みであり、企画にあたり講義内容検討会での議論は重要であった。

4. まとめ

本稿では「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」及び「第56回分子科学若手の会夏の学校」の活動報告を行った。2017年度の夏の学校については、分子科学若手の会事務局新代表 沖野隼之介（学習院大学大学院自然科学研究科岩田研究室博士後期課程1年）を中心に鋭意準備を進めている。

今後とも弊社へのご支援を賜りますよう、分子科学研究所並びに諸先生方をお願い申し上げます。



写真5：全体集合写真。

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

共同研究専門委員会では、分子科学研究所が公募している課題研究、協力研究、分子研研究会、若手研究会、および岡崎コンファレンスの申請課題の審査を行っています。それぞれの公募の詳細については分子研ホームページ（<http://www.ims.ac.jp/guide/>）を参照いただきたいと思います。

共同研究の現状について、平成22年度から平成28年度後期分（平成28年11月10日現在）までの採択数の推移をまとめたものを下記に示しました。分子科学研究所は、文部科学省「ナノテクノロジープラットフォーム」事業における「分子・物質合成プラットフォーム」の実施機関となっており、通常の協力研究に加え、本事業における協力研究も実施しています。また、下表にある「特別協力研究」とは、共同利用研究の予算ではなく、自前の予算を使用して実施された共同研究です。萌芽的な段階における共同研究や、来所を伴わない共同研究などがこれにあたります。特別協力研究により共同研究の芽を見出すことができれば、是非、積極的に「協力研究」や「課題研究」に応募いただきたいと思います。

平成28年度においては、3件の岡崎コンファレンスを採択致しました。共同研究専門委員会において岡崎コンファレンスの申請受付・審査を実施することになった平成24年度以降は、同一年度に複数件の岡崎コンファレンスを実施することが可能（予算状況に応じてではありますが）な状況となっていました。実際に複数件の岡崎コンファレンスを実施するのは今回が初めてのことです。岡崎コンファレンスよりは、もう少し手軽に開催できる研究会としては、「アジア連携分子研研究会」や「ミニ国際シンポジウム」もありますので、これらも積極的にご利用下さい。

共同利用研究の実施状況（採択件数）について

種 別	平成22年度	平成23年度	平成24年度	平成25年度	平成26年度	平成27年度	平成28年度 (11月10日現在)
課題研究	0	1	1	2	1	2	2
協力研究	122	108	123	64	64	62	54
特別協力研究*				167	224	253	154
協力研究（ナノプラット）	—	—	—	51	63	64	41
分子研研究会	6	4	10	10	6	11	6
若手研究会等	1	1	1	1	2	1	1
岡崎コンファレンス	—	—	1	1	1	1	3
計	129	114	136	296	361	394	261

*平成25年度以降、集計開始。平成28年度分は、後期分が未集計。

分子研研究会

開 催 日 時	研 究 会 名	提 案 代 表 者	参加人数
平成28年6月27日～28日	超機能分子の創成：合成、計測、数値が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発	上野 隆史（東京工業大学大学院生命理工学研究科）	29名
平成28年9月2日～3日	有機金属化学の大潮流	平田 修一（分子科学研究所）	80名
平成28年9月29日～30日	日韓台生物無機化学シンポジウム	青野 重利（岡崎統合バイオサイエンスセンター）	46名
平成28年11月10日～11日	若い世代が創る次世代型分子触媒の開発とその展望	榎山 儀恵（分子科学研究所）	41名
平成28年12月2日	表面科学の最先端技術と分子科学（副題 第7回真空・表面科学若手研究会）	上羽 貴大（分子科学研究所）	36名
平成28年12月7日～8日	生体や物質機能の起源にせまる先端的電子スピン計測	小堀 康博（神戸大学大学院理学研究科）	39名

岡崎コンファレンス

開 催 日 時	研 究 会 名	提 案 代 表 者	参加人数
平成28年11月23日～25日	有機電子材料の先端分光に関する国際会議	解良 聡（分子科学研究所）	92名

運営に関わって

大西 政義

大阪大学産業科学研究所
技術室 計測班 班長

おおにし・まさよし／

1983年4月1日付で、大阪大学産業科学研究所技術室工作班機械回路工作掛（公務員当時の職名、現在は同係）に文部技官として採用され、試作工場機械加工室に配属されました。専門職員、係長、工作班長を経て2016年4月1日付で現職を拝命しました。33年間、試作工場機械加工室で研究支援に取り組んでおります。法人化後は、通常業務に加えて、事業場安全衛生委員会委員の業務やPCB管理業務のアシスト等を行っています。



2015年4月から分子研装置開発室の運営委員会委員を務めさせて頂きました。きっかけは、2015年3月19日から20日に開催された装置開発室の「微細加工に関する技術サロン会」に参加させて頂いたことです。その時に飯野先生（以前阪大産研におられました）や、山本装置開発室長、鈴木技術課長、青山班長と交流を深めさせて頂き、そのご縁で山本室長から装置開発室運営委員会委員委嘱の依頼があり、若輩者ではございますがお引き受けした次第です。運営委員会出席や装置開発室施設利用申請の審査により、勤務地とは全く環境の違う研究機関で、共同利用機関としての在り方を学ばせて頂きました。私自身、これまで分子研の技術職員の方々との深い交流はございませんでしたが、記憶を辿りますと分子研技術課主催の技術研究会には第12回（1986年3月19～20日）から参加させて頂いております。その頃から国内の大学や研究機関等の技術職員同士が、研究・教育支援を行う上で必要な技術開発やその過程での問題解決等について熱く討論されておりました。その中でも思い出深いのは、第16回（2000年3月2～3日）に開催された技術研究会です。たしか岡崎国立共同研究機構に岡崎コンファレンスセンターが建設されて初めての開催だったと記憶しておりますが、第3分科会（極低温技術）や第4分科会（計算機技術）での討論会が会場に座りきれずに立ち見が出るほどの熱い盛り上がりを見せていたの

が印象的でした。また、青山機器開発技術班長が当時名古屋大学工学部におられて、圧電アクチュエータを用いた誤差補正切削システムの製作について発表しておられました。その青山班長が、現在JAXAに出向しておられ、短期であっても外の機関に出られる体制づくりがなされているところに分子研のアクティビティを感じますし、改めて人材マネジメントの重要性も感じました。

装置開発室では、所内外研究者による製作／工作依頼への対応と施設利用の推進、ナノプラットフォーム事業・アウトリーチ活動等への参加、最新技術情報の収集、室員自らの技術力向上を目指した自主的な技術開発等を行われておりますが、昔から上記の事柄すべてに対応されていたわけではなく、これまでに培ってきた技術に加え、新たな要望やその時代に必要となってきたニーズに少しずつ応える方向で進んでこられました。その間には、ガラス加工の支援停止や微細加工分野の設立等、その時代時代に必要な選択をされてこられたと思います。今後は、従来のコアな支援技術を枯らさずに、継続して人材を確保し育成することのできる環境整備（工作機械・計測機器類等の計画的更新も含む）と新技術の獲得を行う事が重要だと感じておりました。そんな折、今年度の運営委員会で装置開発室のミッションステートメントが作成されたのは、大変意義のあることだと思います。また、これを実践して

いくためには室員個々が明確なビジョンの元、モチベーションを維持し専門技術の錬磨と発展性のある仕事にチャレンジすることで、魅力あるバリューを提供していくことができると思います。私達も、分子研技術職員の方々との交流を深め、人事交流等を行う事ができればと考えています。分子研が、大学にはできない人材マネジメントの拠点として、ユーザーである教員やそれを支援する技術職員共々のハブとして今後も機能することを期待します。「これからの時代は、純粋に技術的なことからシミュレーションの精度向上や、国際的なものづくりの水平分業といった少し別次元の変化まで、常に世の中の動きを注視しつつ、研究所の方向性に適した解決策を提供できるようにしていきたい。」と山本室長も2014年の装置開発室レポートに書かれていましたが、変わらぬ部分と変えていかなければならない部分をしっかりと見極めて支援しなければならないと思います。

新学術領域 “高次複合光応答” について

宮坂 博 大阪大学大学院基礎工学研究科 教授・領域代表

光吸収により生成する電子励起分子は、エネルギー・物質変換、光機能発現等において重要な役割を果たしています。日本の研究者はこれらの励起状態分子に関わる研究領域において、励起分子素過程や化学反応の解明、新規光機能分子・物質系の開拓、レーザー分光、レーザー物質プロセッシングなどの基礎から応用に至る広い分野において、国際的にも先導的な役割を果たしてきました。しかし、実際にエネルギー、物質変換、また光機能発現などへの利用が期待される10-20以上の原子からなる分子系には、① 高位電子励起状態から最低励起状態への迅速な緩和（Kasha則）や、② 集合系における多数励起分子間の高速励起子消滅（annihilation）など、光エネルギー（光量子や光子の数）利用に対し大きな制限が存在します。更に、③ 通常の光吸収では1光子光学許容状態のみが遷移可能であり、多様な電子状態を有効に利用することも一般には困難です。これらの結果、現在までの研究の多くは、① 質の損失、② 量の損失、また、③ 多様性の損失の“3種の制限”の中で展開されてきました。

しかし、最近ではこれらの3種の制限を超える多重・多光子励起、電子状態変調、分子の協調的応答、集合体設計等に関わる研究結果が、この新学術領域の研究者を含めて国際的にも報告され出しています。このような背景に基づき、これらの3種の制限を超える

励起手法、反応ネットワーク、反応プラットフォーム、分子、分子集合系などの物質系を開拓・発展させ、従来の“1光子吸収と1分子応答”を超える“複合励起と複合光応答”の学理構築と応用を行い、光子有効利用を可能とする高次光機能集合系の構築と今後の光利用関連諸課題の解決に向けた共通基盤の確立を行うことを目的とし、新学術領域「高次複合光応答分子システムの開拓と学理の構築（略称：高次複合光応答、Photosynergetics）（平成26-30年度）」が開始されました。

この領域目的のために、3つの計画項目を組織し、計画班（13グループ）、公募班（19グループ）の間の緊密な連携・協同により研究を展開しています。研究項目A01では、高位電子励起状態へのアプローチ、機構解明・応用開拓を目的として、多重、多光子励起による高位禁制電子状態や局所場を利用した強変調電子状態からの光反応、励起子分裂・融合等を対象に、実験・理論両面から本研究推進において基礎となる複合励起による素過程制御と新規光応答・反応の開拓を行っています。項目A02では、分子間の協調的な相互作用に基づく、光・電子機能性を導出する分子組織構造の創出が目的です。分子・分子集合体の設計と合成手法を用い、1分子レベルの機能からメゾスコピック・マクロレベルの物性変化への展開に必要な“加算性”や“増幅性”が確保できる光機能システムの開

拓・確立を基軸に研究を行っています。項目A03では、機能性分子集合体を基軸としたメゾスコピック複合光応答系を対象に、主に分子構造・集合体構造の変化に基づく機能開拓と機構解明を目的とし、分子集合系に特徴的な協奏的、またコヒーレントな複合過程を利用して複合励起と応答を顕在化させ、リアルワールドで光駆動する分子集合系、多光子吸収により駆動する光応答系や、光強度に閾値を持つ光応答系などの1光子1分子光反応では実現できない高度な複合光応答システムの創出に向けた研究を展開しています。

この新学術領域には、光計測、理論化学、レーザー化学、また、新規分子・分子集合体の合成・構築などを専門とする多くの研究分野の研究者が参加しています。新学術領域の大きなミッションの一つは、共同研究による協同的成果であり、1+1が3や5になるような結果が生み出されることが期待されています。現在までの所、領域内共同研究も80件を超え、その半数程度も既に報文化されています。また、平成27年からは“国際活動支援班”も設置され、国際共同研究にも積極的に留意することが求められています。この新学術領域には存在しない測定手法や物質系を持つ海外の研究グループと相補的な共同研究を行うことは短期的成果につながる場合もありますが、一方、本領域で開発された技術、新物質、概念などが海外に流出することは、国際的競争

を考えれば短期的には不利となる可能性もあります。しかし信頼関係に基づく長期的な共同研究体制が構築されている場合には、中長期的な研究の発展に大きく寄与することが可能です。幸い、私たちの研究領域ではCNRSとの日仏国際共同研究所の設置など、相互に信頼関係を有する体制がいくつか構築されています。このような国際関係を、個々のボトムアップ的な国際共同に加えて、広く欧米・アジア諸国に対

しても拡大し、若手研究者の派遣・招聘を含めた研究者間のネットワーク構築を行うことも、日本の真の国際競争力の維持、拡充につながると考えています。

既述のように、この新学術領域では、従来の化学・光化学の領域においてほとんど顧みられなかった高位・禁制励起状態や変調電子状態、また多励起子の協同応答などを積極的に利用することにより、分子・分子集団系の新規光

応答の開拓と応用を目指しています。これらの研究を通して今後の光子有効利用に対するパラダイムシフトを行うと共に、次代の光利用科学、光エネルギー・物質変換等などの人類共通の課題解決に向けた先導的研究を展開できる若手研究者の育成も大事な視点です。これらの研究の進捗のためには、分子科学に基づく基礎的な分子系の理解とその概念の応用が必須です。皆さまのご支援をよろしくお願い申し上げます。

関連学協会等との連携

JAXA宇宙科学研究所・先端工作技術グループの立ち上げ

岡田 則夫 JAXA 宇宙科学研究所先端工作技術グループ グループ長

2011年2月の分子研レターズ63号で「技術職員OBの今」に、国立天文台・先端技術センター・主任研究技師として寄稿して以来となります。今年度、分子科学研究所や国立天文台を始めとする国内研究機関や大学の協力のもと、新しく宇宙航空研究開発機構(以下、JAXA)宇宙科学研究所(写真1)に、先端工作技術グループが発足したので、紹介させていただきます。このグループは、実験ジグからフライトモデルまで、研究者や技術者の方々と一緒に製作に取り組み「インハウス」での「ものづくり」を実現するために設立されました。私自身も1994年に17年勤めた分子研から国立天文台に移り、さらに2016年からはJAXA宇宙科学研究所の本グループのグループ長として出向しています。分子科学研究所からは、川合眞紀所長以下、関係者のご理解とご協力のもと、技術課の青山正樹氏(写真2)を迎え、JAXAの若手職員とともに

にグループの立ち上げに尽力している最中です。

分子科学研究所が東京大学物性研究所の流れを汲むように¹⁾、宇宙科学研究所にも東京大学生産技術研究所に端を発する工作室が元来ありました。生産研は、国内の大学でもっとも早い、1951年に各研究室に分散していた工作室を集約し、大学の規模を超える一大拠点に発展させました。以後、1989年の相模原移転に至るまで、ペンシルロケットに始まり、ラムダ・ロケットによる人工衛星「おおすみ」の打ち上げ成功、「さきがけ」や「ひてん」、そして小惑星探査機「はやぶさ」など、大学のレベルを超えた研究開発を下支えしたと言っても過言ではありません。相模原移転後は、2003年のJAXA誕生を契機に、人材と予算の効率化によって工作室の体制も縮小を続け、現在は2,3名



写真1 JAXA宇宙科学研究所。

の任期付き職員が学生や職員への汎用工作機械の技術指導を行っているのみとなっています(写真3)。

加工技術の試作検討段階の充実なくして、先鋭的かつ実現可能な宇宙機は実現しません。現在の外部委託中心の加工体制を改革すべく、国立天文台の先端技術センター長を務め、現在は宇宙科学研究所所長である常田佐久理事のもと、「工作室改善検討チーム」が2015年に結成されました。「工作室改善検討チーム」には、理学や工学、教

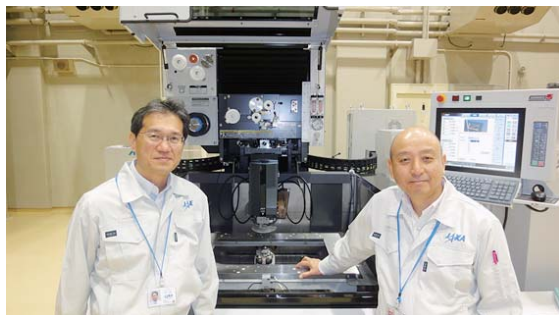


写真2 青山正樹氏（左）と筆者（右）。



写真3 JAXA宇宙科学研究所の従来から持っている3階工作室。

育職や一般職、若手からベテランまで様々な職員が集い、JAXAの新工作室はどのようなものがふさわしいか検討を行いました。私もオブザーバーとして参加し、名古屋大や分子研、天文台などの工作室の規模や装備、運営方法などを参考とし、約半年をかけてプランをまとめました。その中で、以下に示す3つのコンセプトを柱とすることに決まりました。

1. 実験ジグ、BBMからFMまで作ることができる高度な加工技術
2. 高度な加工を可能にする設計支援機能
3. プロジェクト、ミッションの枠を超えて「ノウハウ」を横断的に集約・蓄積するセンター

そこから実際に実現可能な予算と強固な床を持つ部屋を見出し、理想的な仕様から、現実的な仕様に落とし込みました。元々の工作室（写真3：旧工作室）は3階にあり、振動に弱くNC機などの重量機械の導入が困難でした。宇宙科学研究所のみならず全JAXAの理解のもと、1階に新たに技術職員専用のNC機を中心とした工作室を獲得しました。2016年4月から大規模な床の補強工事と天井クレーンの新設が行われ、10月からは工作機械の納入設置が始まりました。現在までにワイヤー放電加工機、NCフライス盤、NC複

合旋盤、汎用フライス盤、汎用旋盤の設置が完了しています。青山さんと共に、それぞれの立ち上げ作業も進んでいます。今年度末には5軸マシニングセンタ、接触式大型三次元測定機も納入が予定され、ようやく新工作室の完成が見えてきました（写真4：新工作室）。

機械は迅速に整備される一方で、加工技術や設計を担う人材は、そう速やかに育つものではありません。先端工作技術グループを担う人材は、JAXAで主流となっている数年ごとのジョブローテーションによるキャリアプランとはマッチしません。かつて工作室を担っていた技術者は、ほとんどが定年退職しています。そこで、先端工作技術グループでは、既に成功を収めている日本各地の工作工場に、協力をお願いしています。これはジョブローテーションが難しく一箇所にとどまりがちな加工技術者にとっても、世界を広げるチャンスです。2016年4月に私が国立天文台から着任したのを皮切りに、8月からは前述のように青山さんに期間を区切って招聘職員として来ていただきました。さらにもう一人、先端工作

技術グループへの出向がきまっています。現時点では分子研出身者の青山さんと私の2名で新工作室の立ち上げと「ものづくり」を行っている状況で、大変忙しく目が回る毎日です。こうみると任期付きの外部からの出向職員、いわば「助っ人」ばかりですが、JAXAでも経験者採用による正規職員の採用が予定されております。日本各地で腕を磨いて来た「つわもの」が揃い、宇宙機器開発に挑むことで、これまで外注に頼っていた体質に少しずつですが変革を与えていけると信じています。

今回、青山さんに来ていただくにあたり、川合所長以下、分子科学研究所の寛大なご理解をいただきました。小杉信博先生、山本浩史室長には大変な調整をしていただき、感謝の気持ちで一杯です。分子科学研究所との技術交流を通じて、今後の宇宙科学、分子科学の発展に貢献していく所存です。引き続き、ご支援とご協力のほど、よろしくお願いいたします。

1) 分子科学研究所の創設の経緯：
https://www.ims.ac.jp/about/old_history.html



写真4 JAXA宇宙科学研究所が新たに整備した1階新工作室。



機器センターから装置開発室へ、異動して思うこと

機器開発技術班 中野 路子

2005年3月に名古屋市立大学院薬学研究科博士前期課程を終了後、同4月より分子科学研究所技術課に920MHz NMRのオペレーターとして採用、2014年7月に装置開発室に異動し、リソグラフィや3Dプリンタによる依頼製作を担当。

2005年に分子科学研究所の技術職員に就職してから早12年が経とうとしています。3年はここで頑張ろうと思って通い始めたこの岡崎で今も働いているのは、この職場が私にとって居心地の悪くない場所だからだと思います。とはいえ、技術職員として悩みながら今があり、機器センターから装置開発室へ異動してみて思うことを書いてみたいと思います。

NMR担当技術職員として

学生時代の研究室でのテーマは「NMRによるタンパク質の立体構造解析」でしたので、縁あってその当時世界最高磁場であった920MHz NMR（核磁気共鳴装置）のオペレーターとして分子研に採用していただきました。それまではNMRのユーザーという立場でしたが、オペレーター兼管理者という立場になり、タンパク質だけでなく有機化合物の測定や多核測定、固体試料の測定など幅広い測定、また様々なトラブルや故障、修理を経験し、装置について多くを学びました。多様なユーザーの皆様やメーカーの方々に育てていただいたと思っています。管理者としての成長は私にとって充実したものでしたし、自分がユーザーのためにこうしたほうがいいと思ったことを実現できる自由な環境は、私に向いていたと思います。しかし5年くらいたっ

た頃からでしょうか、私はこのまま一生NMRの仕事を続けていくのだろうか、と思うようになりました。ユーザーの方から必要とされているレベルにある程度達したと自分で思ったとき、それ以上のレベルアップの意味、その先に自分がすべきことを見失ってしまいました。装置の管理は担当者一人にほぼ任されていたので、自由である反面、私がどのような内容の仕事をしているかを真に理解している人はいなかったため、誰にもその答えを求めることができませんでした。NMRの管理者としては現状維持でもよかったのかもしれませんが、このままNMRという狭い世界であと20年、30年働く未来を想像できませんでした。「時間があるなら研究をしたらどうか」と言われたこともあります。私としては一つの研究室に技術職員が一人で入ってしまうことには不安を感じました。個人ではなくセンターとして、研究室からテーマをもらってそれに取り組むことで技術職員としてのレベルアップをはかるということなら、受け入れられたかもしれません。まだまだ未熟な私は将来的な方向性を考える上で、組織や上司という力も必要だと感じていました。

装置開発室への異動

技術課の課長に現在の鈴木光一課長が就かれ、それまではなかった技術

職員の個別面談が行われるようになりました。課長は個別面談において各個人の仕事内容・仕事量、今後について把握されようと思われたのだと思います。その面談の中で、「異動はありかなしか？」と聞かれ、私は「あります。」と即答したと思います。ここの部署でこんな仕事がしたい、という具体的な希望はありませんでしたが、何か私にやらせてもらえるならば、ぜひ挑戦したいという気持ちからでした。それがきっかけとなり、数年後に「装置開発室でリソグラフィの仕事をしてほしい」と声をかけていただき、2014年7月に装置開発室に異動となりました。

装置開発室は、機械工作、回路工作、微細加工（フォトリソグラフィ）によって研究者が必要としている治具や装置を製作している部署です。素人の私に出来ることあるのだろうかという少々不安な思いと、新しい仕事への期待感を持って装置開発室の扉をたたきました。最初にリソグラフィ技術を教えていただき、まず感じたことは、教えてもらうという喜びと、同じ目線で製作品の完成を喜んだり、失敗の原因を考えたりできる人がいる楽しさでした。また、装置開発室の仕事全般を知るために皆さんからCADに始まり機械工作や真空技術など様々な研修をしていただきました。私の溶接の研修として「おでん鍋を作りましょう」との

提案には最初びっくりしましたが、本格的な持ち手や蓋まで考えて作らせていただき、ものづくりの面白さを教えていただいた気がして、遊び心から生まれる発想も大事にしていきたいと思いました。その後、3Dプリンタによる模型製作をさせていただくことになり、縁あってまたタンパク質とも関わることになりました。

機器センターと装置開発室

機器センターはセンター長が中心にいて、それ以外の職員はそれぞれが別々の機器を担当し、共通の利用ルールや方針に則りつつも、各機器の運営は担当者に任されているといった感じでした。維持管理は大事な仕事だとは思っていますが、装置が新しくならない限り管理者としてのステップアップの機会は少なく、長年にわたってモチベーションを維持し続けるのは難しいと思います。一方で各々が担当装置そのものだけでなくその利用に関するすべてをこなしていたため、共同利用の申請に関すること、予約システムなどネットワークやパソコンに関する知識、といった個人の総合力のようなものを身につけることが出来たのは良かったと思っています。それは異動した今も私の基礎となっています。

装置開発室では室長と二人の班長の打ち合わせによって、大きな方向性は決まっていますが、一方で依頼工作に関してはそれぞれが異なる技術を持って個人で仕事をしている印象です。個別に依頼業務を担当しつつも、設計や加工など共通する技術が根本にある点が機器センターとは異なり、組織としての一体感は作りやすいと思いました。毎週のミーティングで業務報告があり、他の職員の仕事を把握する場となっています。私には業務報告は新鮮

で、最初は戸惑いもありましたが、自分が毎週何をしたかを把握して見直す機会にもなりますし、間違った方向にいつてしまっていないかをチェックしてもらう場にもなり、組織としては必要なことだと思いました。

機器センターと装置開発室に共通して思うことは、個人で得た技術、その人1人しか出来ないことが多々あり、異動や退職などによってせっかく作り上げたものが一瞬でゼロになってしまうのはとても勿体ない、ということです。技術の伝承には長い時間が必要です。もう必要ないから引継ぎをしなかったのならいいのですが、「あの人がいないからもうできない」というようなことにならないよう、必要な重要な技術を見極め、伝承できるような組織を作っていかなければならないのではないのでしょうか。

技術職員の異動について

最近まで私の知る限り技術職員の所内での異動は基本ありませんでしたが、2013年から毎年1～2名の技術職員が異動をしています。その中で私に異動というチャンスを与えてくださった鈴井課長には大変感謝しています。異動したことで、私の視野、可能性は大きく広がりました。私にとっては全くの別世界と思っていた装置開発室、装置開発室のメンバー、工作依頼に求められる研究者の方々に会い、新しい経験をさせていただいています。

私は自分も異動を経験しましたが、装置開発室ではここ数年の間に異動や新人の採用とたくさんの人の入れ替わりがありました。私がそこで感じたことは、人の入れ替わりというのは、人や組織に変化を起こす最適な方法なのではないかということです。新しい人が入ると、その人に教えることで、教



える側も自分の仕事を見直すよい機会になり、再勉強し、成長すると思えます。私もNMRに関する業務の引き継ぎを行いました。それまでなんとなく行っていた業務を整理したり、NMRについて勉強し直したり、教えるペースが早すぎて相手に伝わっていないことに気づかされたり、慣れないことの連続でしたが、引継ぎというのも1つの大きな勉強でした。また、人が出ていくことで、その人に任せていた仕事を残された人がやらなくてはならなくなります。それも1つ新しいことを習得する機会でもあるし、同じ仕事も別の人がやることで見直しがされ、よりよいものになる可能性を秘めています。また、ずっと同じ環境にいと当たり前前に思ってた気づかないことも、異動した人にとっては新鮮で、なぜ?とかもつ

とこうの方がいいのではないかと、前の部署ではこうだった、といった異なる意見・提案が生まれます。同じ環境にいた人の新しい意見よりも、新しく入った人の新しい意見・考え方のほうが受け入れやすく、その時代にあったものへ変えていくチャンスを生み出すのではないかと思います。

もちろん習得するのに20年30年かかる技術もありますし、1つのことを極め続けることも技術者として重要ですから、すべての人を無理に異動させる必要はないと思います。ですが、技術課にも全体を見渡してマネジメント出来る人も必要で、そういった人を育てるには異動も必要だと思います。そこで得られるものは、専門技術だけではなく、仕事への取り組み方や多様な考え方ではないかと思います。

最後に

現在は主に3Dプリンタを使用してタンパク質などの模型製作を行っています。技術課のメンバー5名で始まった3Dプリンタ造形技術育成プロジェクトを通して、いろいろな大きさや形の模型製作に対応できるようになってきました。今後も様々な造形にチャレンジし、装置開発室に既存の機械工作技術等ともコラボレーションすることで、3Dプリンタの活用の幅を広げていけるよう努力していきたいと思っています。

覧古考新07 | 1998年

この分子研には優秀な研究者が薈集し、世界に注目される成果を挙げてきたことは誰の目にも明らかである。また、分子科学研究所の果たした大きな貢献として、助教授クラスの若い研究者を多く育てたことを挙げたい。彼らは現在分子科学分野の中核として活躍している。

分子科学で最先端のトピックスとして研究されてきた対象は時々刻々変化し、創立当時に取り扱われていた研究テーマもここ数年の間大きな変化があると予想される。必ずしも王道を行くような研究テーマではなくてもよいから、この研究所でしか出来ないような冒険的な研究に挑戦して戴きたいと希望している。

.....

新しい画期的な考えをする人を選び、その人にすべてお任せするしかない。少しは不確定要素があっても、画期的な着想を持つ人を選べば、自然に素晴らしい成果が挙がるという考え方は極論であろうか。

分子科学研究所が強力な研究機関としてこれからも活躍し、また独立した若手の人材を分子科学の中核研究者に育てて世に送り出す役割も同時に果たしていけることを祈念している。

分子研レターズ No.37 巻頭言「分子科学研究所 2010年」(1998年)
近藤保 (東京大学名誉教授)

E V E N T R E P O R T

夏の体験入学2016

担当教員 2016年度担当教員

総研大物理科学研究科構造分子科学専攻 准教授 古谷 祐詞

2016年8月8日(月)から11日(木)までの4日間、分子科学研究所(分子研)において、第13回総合研究大学院大学(総研大)夏の体験入学が開催されました。本体験入学は、他大学の学部学生・大学院生を対象とするもので、各研究室での体験学習を通じて、特に、最先端の研究に触れることで、分子研(総研大物理科学研究科構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)における研究環境や設備、大学院教育、研究者養成、共同利用研究などの活動を知ってもらい、分子研や総研大への理解を広げてもらうことを目的としています。

本年度は例年以上の多数の申込(52名)があり、選考の結果、26名の学生(学部学生21名、大学院修士課程学生5名)を受入れることにしました。選考においては、学部3年生、4年生、修士1年生など大学院への進学が近い学生を優先しました。初日には、午後から明大寺地区でオリエンテーションを開催しました。総研大・分子研の紹介に続き、各実施グループによる体験

プログラムの紹介を行いました。その後、UVSORと計算科学研究センターにおいて施設見学を行いました。9日、10日の2日間は、各グループにおける体験プログラムの実施に割り当てられました。最終日の11日には、2日間の体験プログラムの結果を個別に発表してもらいました。発表内容から、各グループにおいて充実した研究体験があったことが伺えました。実施したアンケートでは、それぞれの研究分野に対する興味が増したなど、研究体験が有意義と感じたとの回答が多数ありました。また、大学と比較して、自主性が重んじられる、教授との距離が近い、研究に専念する環境としては適しているなど、研究環境として魅力を感じるという回答が多数でした。一方、専門的な知識や実験に関する知識が不足しているため体験内容が難しいと感じたなどのコメントもありました。進路について、総研大を選択肢の1つとして考えている学生が19名いました。これまで2010年～2015年の間に夏の体験入学やオープンキャンパスに参



加した学生の内、11名が総研大に入学しています。今後も参加した学生の方々が、総研大の大学院生や他大学からの特別共同利用研究員となって、分子研で研究することを願っています。

今年から山の日が施行され、休日にもかかわらず様々な方々にお手伝いをいただきました。最後に、本事業にご協力いただきました全ての先生方、関係者の皆様方にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。

E V E N T R E P O R T

総研大アジア冬の学校2016

担当教員 2016年度担当教員
総研大物理科学研究科機能分子科学専攻 准教授 椋山 儀恵

総研大アジア冬の学校が、平成28年12月14日（水）から15日（木）にかけて、岡崎コンファレンスセンターにおいて開催されました。総研大アジア冬の学校は、総研大物理科学研究科各専攻で行われている研究・教育活動を、アジア諸国の大学生・大学院生および若手研究者の育成に広く供することを目的として平成16年度に始まりました。今回で13回目になります。本年度は、構造分子科学専攻、機能分子科学専攻2専攻での開校となりました。アジア諸国から多数の応募があり、書類選考を経て、7名を受け入れました。海外からの参加者1名、所外の国内参加者1名、インターンシップの留学生6名、所内から52名の参加登録をいただきました。

構造分子科学専攻から石崎先生、機

能分子科学専攻から中村先生を講師としてお迎えし、「分子科学、新分野への挑戦」をテーマに、分子科学の基礎にはじまり、最先端の研究および将来展望が紹介されました。また、参加者によるポスター発表や歓迎会が行われました。短い開催期間でしたが、充実した内容となりました。

講義やポスター発表を通じ、物理

および化学の基礎から最新の研究成果まで学び知ることができたと思います。講師の先生方に深く感謝申し上げます。尚、本学校を開催するにあたり、分子科学研究所の担当委員の先生方、秘書、総研大生の多くの方々のご協力をいただきました。この場をお借りいたしまして、厚く御礼申し上げます。



平成28年度9月総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

専攻	氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
機能分子科学	Haesuwannakij, Setsiri	Size and Interfacial Effect on Gold Nanocluster Catalysts	理学	H28. 9.28
	Yan, Shuo	Development of Green-Sustainable Copper Catalysts Immobilized on Polystyrene-Based Resins to Achieve Efficient Organic Transformations	理学	H28. 9.28

総合研究大学院大学平成28年度（9月入学）新入生紹介

専攻	氏名	所属	研究テーマ
機能分子科学	KALATHINGAL, Mahroof	理論・計算分子科学研究領域	Theoretical studies on ion permeation mechanism of the model channel Polytheonamide B
	SHEN, Guanshuo	生命・錯体分子科学研究領域	Development of asymmetric and heterogeneous catalysis for effective organic transformation
	HIRANYAKORN, Methanee	岡崎統合バイオサイエンスセンター	Dynamical ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions

受賞者の声

橋谷 俊 (物理科学研究科 構造分子科学専攻 5年一貫性博士課程5年)

NFO-14 The Best Poster Presentation Award およびOSJ-OSA Joint Symposia Student Award

2016年9月4 - 8日に浜松アクロシティで開催されたNFO-14 (The 14th International Conference on Near-Field Optics, Nanophotonics and Related Techniques) にてポスター発表を行い、The Best Poster Presentation Awardを受賞しました。また、10月30 - 31日に筑波大学東京キャンパスで開催されたOSJ (日本光学会) - OSA (アメリカ光学会) Joint Symposia on Plasmonics and Digital Photonicsにて口頭発表を行い、Student Awardを受賞しました。私は英語での発表に不安もありました

が、無事やり遂げることができ、さらにこのような形で評価していただけたということで、少し自信が持てるようになりました。

受賞対象となった研究は、アキラルな(キラルでない)ナノ物質にアキラルな直線偏光を照射した場合でも、ナノ物質の周辺において局所的にキラルな円偏光電場が発生する事を実験的に明らかにしたというものです。ナノ空間に局在するキラルな光場は、高感度分子キラリティ検出等に応用できると期待されており、今後はそのよ



授賞式にて OSA会長Prof. A. Willner (左)、Joint Symposia Chairの尾松孝茂 千葉大教授(右)と筆者(真中)。

うな方向にも研究を展開していきたいと考えています。

最後に、今回の受賞にあたり研究および研究発表をご指導いただきました岡本裕巳教授をはじめとする研究室の皆様に、この場を借りて感謝の意を表します。

榎本 孝文 (物理科学研究科 構造分子科学専攻 5年一貫性博士課程3年)

錯体化学会第66回討論会のポスター賞および Dalton Transactions Award

2016年9月10日 - 12日に福岡大学で開催された錯体化学会第66回討論会にて「歪んだフタロシアニン化合物を利用した近赤外光誘起電子移動反応 (Near-infrared Light Induced Electron Transfer Reaction Using Distorted Phthalocyanine)」というタイトルでポスター発表を行い、錯体化学会よりポスター賞を、また、Royal Society of Chemistryより最優秀ポスター賞であるDalton Transactions Awardをいただきました。セッションでは、審査員の先生から学生まで幅広い方々から熱いディスカッションを頂き、非常に良い刺激を

得ることが出来ました。

今回の受賞対象となった研究では、一般に広く用いられている“可視光”よりもエネルギーの低い“近赤外光”を駆動力として動作する、光誘起電子移動反応(光のエネルギーを電気化学的なポテンシャルへと変換する反応)系の構築を試みました。歪み構造を有するフタロシアニン化合物に着目し、これを色素分子として利用することで、低エネルギーの近赤外光でも光誘起電子移動反応が駆動できることを実験的に証明いたしました。今後は近赤外光で創り出した電気化学的なポ



授賞式にて 左より 正岡准教授、西原東京大学教授(錯体化学会 会長)、筆者、近藤助教。

テンシャルを利用し、貯蔵可能な化学エネルギーにまで変換することを目指しています。

今回の受賞に際し、多くのご支援とご指導を賜りました正岡重行准教授、近藤美欧助教をはじめとする研究室の皆様に深く感謝いたします。今後ともこの受賞を励みに、多くの面白い成果を残せるよう精進して参ります。

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 111 回	平成 29 年 2 月 3 日	特別編・分子をデザインする	楢山 儀恵（分子科学研究所 准教授） 古賀 信康（分子科学研究所 准教授）
第 112 回	平成 29 年 3 月 24 日	生物発光が拓く生命科学と未来社会	永井 健治（大阪大学産業科学研究所・教授）

■分子研コロキウム

回	開催日時	講演題目	講演者
第 891 回	平成 28 年 9 月 16 日	走査トンネル顕微鏡によるスピン・超伝導特性のナノスケール計測	長谷川 幸雄（東京大学物性研究所・准教授）
第 892 回	平成 28 年 10 月 11 日	Building with Crystals of Light and Quantum Matter: From clocks to computers	Dr. Ana Maria Rey (Fellow, JILA, University of Colorado/NIST)
第 893 回	平成 28 年 11 月 18 日	超柔軟有機デバイスのウェアラブルエレクトロニクス応用	染谷 隆夫（東京大学大学院工学系研究科・教授）
第 894 回	平成 28 年 11 月 30 日	What does a publisher do? - from submission to publication and beyond -	Dr. Hiromitsu Urakami (RSC Manager, Royal Society of Chemistry Japan)
第 895 回	平成 28 年 12 月 16 日	X-ray Crystallography and Spectroscopy of Photosystem II Using a Femtosecond X-ray Laser	Dr. Junko Yano (Senior Scientist, Lawrence Berkeley National Laboratory)
第 896 回	平成 29 年 1 月 16 日	Structure and dynamics of water molecules at the water-air and ice interfaces	Prof. Dr. Mischa Bonn (Director, Max-Planck Institute for Polymer Research (MPIP))
第 897 回	平成 29 年 1 月 20 日	特殊ペプチド創薬：基礎研究からイノベーションへ、その一例としてのペプチドリーム社	菅 裕明（東京大学大学院理学研究科・教授）
第 898 回	平成 29 年 1 月 23 日	Probing quantum nature of interfacial water at atomic scale	Prof. Ying Jiang (Associate Professor, International Center for Quantum Materials, Peking University)

■人事異動（平成28年6月2日～平成28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
28. 6.30	江 東 林	兼終	任了	（北陸先端科学技術大学院大学マテリアルサイエンス研究科 教授）	物質分子科学研究領域 分子機能研究部門 教授（兼任）
28. 7. 1	岡 本 裕 巳	併任	研究総主幹		（光分子科学研究領域光分子科学第一研究部門 教授）
28. 7. 1	小 杉 信 博	併解	任除	（光分子科学研究領域光分子科学第三研究部門 教授）	研究総主幹
28. 7. 1	近 藤 未菜子	新採	規用	協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 技術支援員	
28. 7.31	甲 田 信 一	辞職		分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 助教	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員
28. 7.31	MIRIAN, Najmeh Sadat	辞職	※（伊） Elettra Sincrotrone Trieste		極端紫外光研究施設光源加速器開発研究部門 研究員 (IMS フェロー)
28. 7.31	川 口 玄 太	退職		分子科学研究所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 特任助教（分子科学研究所特別研究員）	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 研究員
28. 7.31	鬼 武 尚 子	辞職			技術課 事務支援員
28. 8. 1	甲 田 信 一	新採	規用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 助教	分子科学研究所理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 研究員
28. 8. 1	青 山 正 樹	配置換		技術課付班長	技術課機器開発技術班長
28. 8. 1	青 山 正 樹	在出	籍向	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所先端工作技術グループ 主任	（技術課付班長）
28. 8. 1	川 口 玄 太	新採	規用	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 特任助教（分子科学研究所特別研究員）	分子科学研究所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 研究員
28. 8. 1	小 出 明 広	新採	規用	物質分子科学研究領域電子構造研究部門 特任研究員	日本学術振興会特別研究員（PD）
28. 8. 1	竹 内 嵩	新採	規用	理論・計算分子科学研究領域理論分子科学第一研究部門 特任研究員	日本大学理工学部理工学研究所 研究員
28. 8.19	船 木 雪 乃	辞職			協奏分子システム研究センター階層分子システム解析研究部門 技術支援員

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
28. 9. 1	伊 藤 卓 郎	新 採	規 用 岡崎統合バイオサイエンスセンター生 命動秩序形成研究領域 技術支援員		
28.10. 1	後 藤 麻 子	併 任	研究力強化戦略室 特任専門員	(総務部国際研究協力課 特任専門 員)	
28.10. 1	MEISSNER, Matthias	新 採	規 用 光分子科学研究領域光分子科学第三 研究部門 研究員	※ (独) Jena 大学 大学院生	
28.10. 1	YAN, Shuo	職 変	名 更 生命・錯体分子科学研究領域錯体触 媒研究部門 研究員	分子科学研究所 研究支援員 (RA)	
28.11. 1	近 藤 聖 彦	昇 任	技術課機器開発技術班 機器開発技 術二係 係長	技術課機器開発技術班 機器開発技 術二係 主任	
28.11. 1	MEISSNER, Matthias	名 付	称 与 光分子科学研究領域光分子科学第三 研究部門 研究員 (IMS フェロー)	光分子科学研究領域光分子科学第三 研究部門 研究員	

編集後記

寒風吹きすさぶ夕暮れ、あかね雲が南へゆっくりと流れて行く様子を眺めながら、この編集後記を書いています。この分子研レターズ75号が皆様のお手元に届くのは、岡崎城公園周辺がソメイヨシノに彩られ、春本番を迎えた頃でしょうか。年末年始のご多忙中にも関わらず、ご執筆をお引き受けいただいた皆様には、編集委員一同心よりお礼申し上げます。

小森機構長が巻頭言で言及されているように、本年度から第3期中期目標・計画期間が始まり、自然科学研究機構の共同利用・共同研究体制の改革が本格的に開始されています。最近の分子研レターズを読んでいると、過去二期間の運営費交付金削減に依って、特に地方大学における研究環境の悪化が顕著である様子が窺えます。そのような状況だからこそ、大学共同利用機関としての分子研への期待は、以前にも増して高まっていると感じます。本号の中でも、レターズの阿波賀先生をはじめ、分子研に対する期待や貴重なご意見、ご提言を頂戴しています。やはり分子研レターズは、分子科学コミュニティ（定義については、山本編集委員長のコラム(P.25)をご覧ください）からの“生の声”を聞くことができる貴重な媒体であることを、本号の編集作業を通じて再認識した次第です。一方で、数多くの受賞や研究会活動報告、共同研究ハイライトや大学院教育など、分子研のアクティビティーをお伝えできたのではないかと思います。今後も分子研レターズが、研究所内外の分子科学研究者間のコミュニケーション媒体となりますよう、引き続きご支援とご協力の程宜しくお願い致します。

編集担当 繁政 英治

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.

75

分子研レターズ

発行日 平成29年3月（年2回発行）

発行 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

分子科学研究所

分子研レターズ編集委員会

〒444-8585

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編集

山本 浩 史（委員長）

繁政 英 治（編集担当）

岡本 裕 巳

奥村 久 士

大迫 隆 男

加藤 晃 一

平等 拓 範

西村 勝 之

古谷 祐 詞

向山 厚

柳井 毅

小杉 信 博（史料担当）

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

