

諸熊奎治名誉教授に恩賜賞・日本学士院賞

木村真一准教授に平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞

山田陽一博士に平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞

根岸雄一助教に第57回日本化学会進歩賞

吉田久史氏に日本化学会化学技術有功賞

十代健助教にナノ学会第6回大会若手優秀発表賞

諸熊奎治名誉教授に恩賜賞・日本学士院賞



分子科学研究所および総合研究大学院大学の名誉教授（現在、京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー）の諸熊奎治先生が平成20年度の恩賜賞・日本学士院賞を受賞されました。授賞式は6月9日に天皇皇后がご臨席のもとに日本学士院で行われ、記念講演会と祝賀会は6月28日に福井謙一記念研究センターで盛大に行われました。恩賜賞は日本学士院の賞の中でも最も権威のある賞で、毎年授賞される学士院賞の中から特に優れた学術研究に与えられます。諸熊先生は理論化学と計算化学を現在の学術レベルに

まで育て上げられた草分け的存在であり、多岐にわたる分野で精力的に研究を進め、研究論文も600報にのぼります。その研究成果は理論化学、計算化学、実験化学という分野を問わずに極めて高く評価されています。このために、平成4年には日本化学会賞を、平成5年には世界理論有機化学会よりシュレーディング賞を、平成17年にはアジア・太平洋理論・計算化学会より福井謙一賞をも受賞されています。また、平成12年より国際量子分子科学アカデミー会長を2期6年間にわたって務められ、国際レベルで量子化学分野の発展と実験化学分野への波及に大きな業績を上げられています。

諸熊先生は、昭和32年に京都大学工学部工業化学科を卒業後、昭和37年に同大学大学院工学研究科博士課程を単位修得退学し、昭和37年に京都大学工学部燃料化学科に助手として採用され、昭和38年に京都大学より工学博士の学位を修得されました。昭和39年に米国コロンビア大学客員助教授、博士研究

員に採用され、米国ハーバード大学博士研究員、米国ロチェスター大学助教授、准教授を経て、昭和46年に同大学教授に昇進されました。その後、創設時の昭和51年に分子科学研究所に着任され理論研究系分子基礎理論第一研究部門の教授を、平成5年に米国エモリー大学教授に就任されるまで務められました。この期間、分子科学研究所の初代の計算センター長も兼務されて、我が国の理論化学と計算化学の国際的な発展に多大なる功績を残されたのは周知のことです。電子状態理論分野の第一線で現在活躍しているほぼすべての研究者が諸熊先生の指導や影響を直接にあるいは間接に受けて育ったと言っても過言でないほど、人材育成にも大きな足跡を残されました。

今回の恩賜賞・日本学士院賞の受賞は、諸熊先生の長年にわたる「分子の構造・機能・反応設計に関する理論的研究」に対するものであり、受賞理由（日本学士院ホームページより引用）は、「量子理論に基づく計算化学の新しい手法

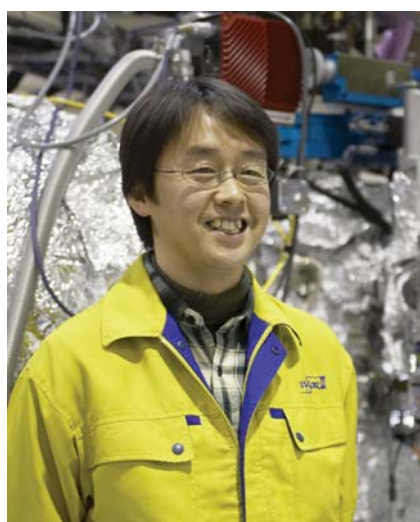
を開発し、電子計算機を駆使することによって、様々な分子の構造と機能の予測およびその反応設計に関して、顕著な理論的業績を挙げた。研究対象も、小分子系の化学反応の精緻な研究からタンパク質などの巨大分子の構造と機能に関する研究などと多岐に亘っている。例えば、フラレン、ナノチューブなどの炭素系分子材料の生成過程の解明や、遷移金属錯体による均一系触媒反応の反応機構の解明は、特に顕著な業績である。さらに、化学反応の機

構と経路を研究するための有用な方法を展開して、化学反応の理論設計を容易にするとともに、巨大分子系を効率的に研究するためのオニオム法を開発して、巨大分子系の量子理論の研究に新しい道を開いた」で、理論・計算化学学術分野の発展への貢献が特に認められたもので、物質科学全般へ波及効果がますます高められることが期待されています。

諸熊先生は現在も、独創的な考えによる様々な新しい理論的研究アプロー

チ法を開発して、物質科学ばかりでなくバイオサイエンス分野の計算ターゲットを格段に広げておられます（最近の具体的な研究内容や発表論文は、<http://falcon.fukui.kyoto-u.ac.jp/top/eng/>を参照）。今回の受賞を心よりお祝いします。今後とも日本の理論化学と計算化学のさらなる発展とこの分野の人材育成の国際的なトップリーダーとして精力的なご活躍を続けられることを是非ともお願い申し上げます。

(永瀬 茂 記)



物質の物理化学的性質を分子・原子のミクロなレベルでの非破壊分析ができる赤外・テラヘルツ（遠赤外）線を用いる分光分析・顕微分析技術は、基礎科学から犯罪捜査に至る幅広い分野で重要な役割を果たしており、現在では簡便な分析技術として普及しています。しかしながら、従来の赤外・テラヘルツ分光は低輝度の黒体放射光源を用いているため、微小試料やテラヘルツなどの長波長での実験研究に不向きであり、新光源の開発が待ち望まれていました。

そのような中で、木村准教授は神戸大学の難波孝夫教授とともに、従来の光源よりはるかに高輝度なシンクロトロン放射光が赤外・テラヘルツの光源として利用可能なことを世界最初に検証しました。また、赤外放射光利用のための専用観測システムをUVSORにおいて世界に先駆けて開発し、かつ、従来の空間分解能をはるかに超える赤外・テラヘルツ顕微分光法の開発をUVSORおよびSPring-8で行いました（図1）。さらに、赤外放射光を用いて、これまで不可能と考えられていた各種の分光法を実現しました。すなわち、新奇物質や高機能性材料の遠赤外領域の光学定数の精密測定や電子状態の決定、高圧下の赤外・テラヘルツ分光（図2）、赤外磁気円偏光二色性、お

よび、低温・高圧・高磁場下のいわゆる多重極限環境下での赤外分光などです。これらの方法論は、放射光の特徴である高輝度性および偏光特性を利用したものであり、他の光源では実現が難しいものです。

難波・木村両氏が開発した赤外放射光は、物質科学にとどまらず生命科学の分野でも有用であり、現在では世界的な赤外放射光利用研究の普及へと

木村真一准教授に 平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞

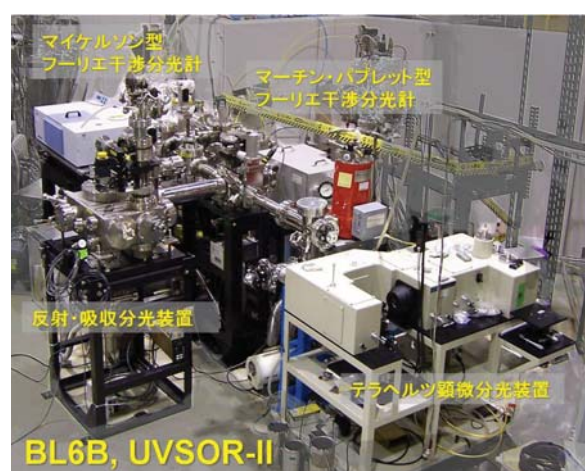


図1 2004年にUVSORで再構築された世界最高強度の赤外放射光が得られる赤外・テラヘルツビームライン。

発展しています。今後も、両氏は物質科学での超伝導や巨大磁気抵抗などの新奇機能性の開発などをはじめとして、広く放射光利用研究の発展に貢献して下さるものと期待しております。

(小杉信博 記)

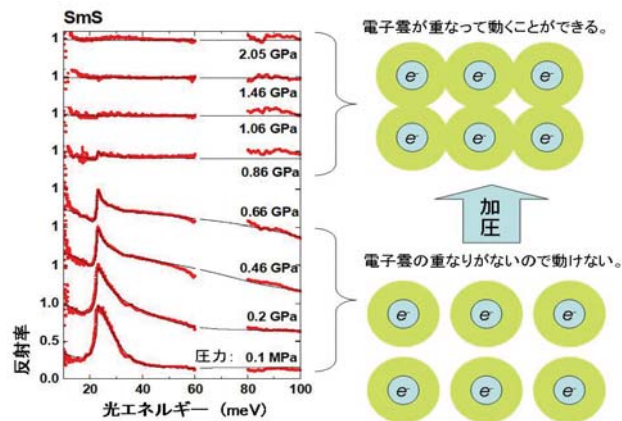


図2 硫化サマリウム (SmS) の圧力誘起絶縁体・金属転移のテラヘルツ反射スペクトルの変化と電子状態の概念図。

山田陽一博士に平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞

理化学研究所基幹研究所副チームリーダーである山田陽一博士(元: 錯体触媒研究部門助教)が、「自己組織化金属高分子触媒創製の研究」で平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞した。本賞は文部科学省より授与されるもので、萌芽的な研究、独創的視点に立った研究等、高度な研究開発能力を示す顕著な研究業績をあげた40歳未満の若手研究者を対象としたものである。表彰式は平成20年4月15日(火)に虎ノ門パストラルにて行われた。

平成19年9月まで私の主宰する研究室の助教であった山田博士は、平成11年に東京大学大学院薬学系研究科(指導教官: 柴崎正勝教授)で博士号(薬学)を取得後、帝京大学助手(池上四郎研究室)、スクリプス研究所リサーチアソシエート(K. C. Nicolaou研究室)を経て、平成15年より分子研の助教として赴任した。平成19年10月に理化学研究所・物質情報変換化学研究グループ物質変換研究チーム(魚住研究室)の副チームリーダーとして転出し、現在に至っている。

山田博士の受賞対象となった研究成

果は下記の通りである。

1) 水・有機分子に対し親和性を有する鎖状高分子配位子と金属化合物との自己集合により金属架橋された不溶性高分子触媒を創製した結果、高活性で再利用可能な固相触媒の開発を実現した。従来の固相触媒に比べ、著しく触媒活性が向上し、再利用が可能となった触媒の創製に成功し、鈴木-宮浦反応にて世界最高の触媒回転数(100万回以上)を誇る固相触媒を開発した。

2) 金属ナノ粒子分散型触媒の開発に成功し、今まで実現されていなかった空気雰囲気下、有機溶媒非存在下での、アルコールをアルキル化剤としたケトンの α -アルキル化が達成された。今までに実現されなかった反応を実現することができたばかりなく、有毒で環境汚染が指摘される有機溶剤を溶媒に用いる必要のない反応系の構築に繋がった。

3) 金属導入型低分子有機ゲルが初めて、芳香族ハロゲン化合物と芳香族ホウ素酸との反応である鈴木-宮浦反応で水中空気雰囲気下にて有効に機能することを示した。

4) 世界で初めてマイクロリアクター



内の界面上に固相触媒膜を導入することに成功し、世界最速(4秒)の固相反応系を開発に成功した。マイクロリアクターの層流界面(マイクロ流路の中心)に触媒膜を導入する方法論が今までに存在しなかったため、候補者が開発した触媒膜導入法は、マイクロリアクターでの固相触媒システムの構築法のブレークスルーとなった。

分子研から羽ばたいた山田博士には、理研においても最先端のさらなる研究推進を期待したい。

(魚住泰広 記)

根岸雄一助教に第57回日本化学会進歩賞



100個以下の原子で構成される金属クラスターは、バルク金属ではみられない、構成原子数に顕著に依存した特異的な構造・物性を発現するため、機能性ナノ材料の基盤物質として大きな可能性を秘めている。金属クラスターの特質を生かした材料創成を実現するためには、クラスターの構造や物性が構成原子数の変化に対してどのように振る舞うかを追跡し、機能発現のメカニズムを理解することが必要不可欠である。根岸助教は、チオラートやホスフィンなどの有機配位子で保護された金属クラスターを対象として、化学組成（金属原子数と有機配位子数）を原子・分子レベルで規定しながら系統的に合成する方法を初めて確立した。さらに、本手法で合成した有機配位子保護金属クラスターの構造や物性の評価に取り組み、金属クラスターに関する基礎学術の進展に資する先駆的な成果を挙げた。根岸助教の研究成果は、大きく分けて以下の3つになる。

1. 有機配位子保護金属クラスターの精密分画法と同定法の確立

有機配位子の共存下で金属イオンを化学的に還元して得られる有機配位子保護金属クラスターのコアサイズは、金属原子の凝集過程の統計性に由来する分布幅をもつ。根岸助教は、配位子の性質に応じた方法でサイズごとに分画し、その化学組成を非破壊質量分析

により決定することによって、有機配位子保護金属クラスターの精密、かつ系統的な合成を実現した。例えば、解離性官能基をもつ有機配位子で保護された金クラスターに対しては、その電荷を利用してポリアクリルアミドゲル電気泳動法によって分画し、自作の高感度エレクトロスプレーイオン化(ESI)質量分析装置によって組成を決定した。一方、疎水性有機配位子を用いた場合には、リサイクルサイズ排除クロマトグラフィーや溶解度の差を利用して分画した後に、化学的酸化/還元反応によって金クラスターをイオン化し、ESI質量分析法によって組成を決定した。本手法は、再現性および他の系への拡張性も高いことから、今後、クラスター研究における基盤技術として利用されるものと期待される。さらに本手法によって、これまで気相に孤立した状態でのみ生成が可能であったサイズの規定された金クラスターを安定化合物として取り扱うことができるようになり、多角的かつ複合的な構造・物性の評価が可能となった。

2. チオラート保護金クラスターの安定性・構造・物性の解明

チオラート(RS)で保護された金ナノ粒子(直径2 nm以上)については、すでに「粒径」を制御する方法が確立され、電子デバイスやバイオセンサーへの応用展開が活発に検討されている。一方、新規な物性・機能の発現が期待される金クラスター(直径1 nm以下)については、これまでサイズ選択的合成法が確立されていないため、構造や基本的性質に関する情報は極めて限られていた。根岸助教は、チオラート保

護金クラスターの安定性・構造・物性を系統的に調べ、化学組成との相関について、以下に挙げる成果を得た。

(1) 魔法組成の発見：根岸助教はまず、調製ルートやチオール分子骨格を変えながら単離されるクラスターの組成を網羅的に調べ、湿式法で得られる多くのクラスターはコアの成長に対して保護膜の形成によって速度論的に安定化されていることを見いだした。そこで次に、熱力学的・化学的に安定な組成を決定するために、チオール(RSH)によるコアのエッチング反応に対する安定性を調べた。その結果、 $\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}$ 、 $\text{Au}_{38}(\text{SR})_{24}$ 、 $\text{Au}_{144}(\text{SR})_{59}$ など魔法組成と呼ばれるクラスターを発見した。根岸助教はさらにこの安定性の差に着目し、ワンポットで魔法組成クラスターのみを選択的かつ大量に合成することに成功した。

(2) 構造・物性の解明：根岸助教は、紫外可視吸収分光、X線光電子分光などの汎用的な測定に加え、 ^{197}Au メスバウワー分光、X線円二色性分光など最先端計測によって構造・物性に関する基礎データを収集した。単結晶X線回折法による構造解析が困難な $\text{Au}_n(\text{SR})_m$ クラスターの幾何構造については、理論部門の信定准教授と連携しながら解析を進め、金コアの周囲を金/チオラートオリゴマーが取り囲んだ構造をもつことを見出した。この界面構造は、現在最も広く受け入れられているバルク金表面上のチオラート自己組織化単分子膜構造とは対照的であり、クラスター領域では特異的な界面構造をもつことを示している。また、フォトルミネッセンス・強磁性的なスピン偏極・光学活性の発現が、この界面構造と密接に

関わっていることを明らかにした。

3. 表面修飾による金クラスターの構造制御

チオラート配位子が金原子を架橋しやすいという性質に着目し、二つのAu₁₃クラスターがチオラートにより連結された双二十面体クラスターの創製に成功した。魔法数クラスターが連結することによって新しい光学特性が観測されたことから、本クラスターはク

ラスター集積化合物群の足がかりと言える画期的な化合物である。また根岸助教は、金クラスターをBINAPやシクロデキストリンなどの特殊な構造をもつ配位子と複合化させ、金クラスターに対して光学活性や分子認識能を付与することにも成功した。

以上のように、根岸助教は、有機配位子保護金属クラスターを精密かつ系統的に合成するための一般性・汎用性

の高い実験手法を確立し、それを活用することで金属クラスターの構造・物性の理解に対して飛躍的な進展をもたらした。得られた知見は、金属クラスターを基盤とする機能性ナノ物質の創製に向けた設計指針を与えるものと期待される。

(佃 達哉 記)

吉田久史氏に日本化学会化学技術有功賞

このたび技術課電子機器・ガラス機器開発技術班長の吉田久史氏が日本化学会化学技術有功賞を受賞された。受賞タイトルは「分子科学研究のための先進的計測・制御機器の開発」である。同氏は、1980年に分子科学研究所装置開発室に着任し、以来永年にわたり分子科学の先端的研究に不可欠な実験装置の開発に従事されてきた。代表的な製作装置には「ナノ秒時間分解蛍光寿命測定装置」や「マルチチャンネル吸光度測定装置」などの分光測定装置をはじめ、「パルス分子線発生装置」、「TOF型質量分析器のための超高速高圧パルス発生回路」、「有機電解合成用多チャンネル定電流源」、「物理特性測定装置を使用した熱電能測定プログラム」などが挙げられる。また、分子科学の研究分野で培った測定技術は、東京大学および国立天文台との共同開発で製作したわが国初めてのサブミリ波電波望遠鏡の観測装置にも活かされ、化学研究の分野を超えた広い領域で業績を残されている。以下に、受賞理由となった代表的な業績を紹介する。

1. 電子線コンプトン散乱の反応顕微鏡のための多次元同時計測回路

空間的配向を特定した分子を標的として高速電子衝撃イオン化の動力学的完全実験を行う装置のための多次元同時計測回路を開発した。この計測装置により、イオン化で生成する非弾性散乱電子、電離電子、解離イオンの3種の荷電粒子のベクトル（エネルギーおよび角度）相関の測定が可能となり、標的分子の空間的配向をもパラメータとする電子・分子衝突立体ダイナミクス研究の開拓と共に、分子軌道の形を運動量空間において3次元観測する原理の実証に大きく貢献した。本装置の開発は、東北大学との十数年にわたる共同利用研究の実績の積み重ねによるものである。また、この時に始まった東北大学技術職員との技術交流は、全国の技術職員を対象とした技術課の受け入れ研修として制度化され現在も実施されている。



2. 液体ヘリウム自動供給システム

極低温センター（現機器センター）技術職員との技術協力により、液体ヘリウム貯槽から移送用の小口容器への汲み出し作業を自動化するシステムの開発を行った。同氏は、システム全体の計測・制御回路およびソフトウェアの製作に携わった。とくに、液体ヘリウム充填時の蒸発ガスの圧力特性から充填完了を確実に検知するためのプログラムの開発により、不慣れな研究者でも簡便な操作で確実に作業することを可能とした。本装置は順調に稼働し実績を挙げ、全国の大学や附属研究所の寒剤供給施設で同様のシステムを導入する際の原型となっている。

(宇理須恒雄 記)

十代 健助教にナノ学会第6回大会若手優秀発表賞



物質分子科学研究領域・電子構造研究部門・助教の十代 健氏がナノ学会第6回大会若手優秀発表賞を受賞しました。受賞題目は、「自己組織化銅アセチリドを前駆体としたカーボン材料」です。

今回の受賞研究は銅アセチリドナノワイヤー結晶を爆発を起こさないように徐々に200℃まで昇温し、炭素被覆中に銅の芯をもったナノケーブルを生成させ、この銅を酸やアルカリで部分的に溶かしだして、機能を持たせ

ることに成功したものです。銅を完全に着けたままのケーブルが低温領域での酸素センサーとして機能することは既に、J. Am. Chem Soc. 誌のCommunicationに掲載されましたが、今回は、炭素層の中に僅かな銅を残した炭素材料の分光学的な研究と興味ある機能発現の高いポテンシャルを示したことによります。このユニークなナノ材料の開発研究が高く評価されました。

(西 信之 記)