

# 研究報告書

-2016年度研究会活動-

第24回 研究報告会

2017年7月11日

**ATI** 公益財団法人 **新世代研究所**  
FOUNDATION ADVANCED TECHNOLOGY INSTITUTE



## 目次

### I. 研究会活動報告

- (1) 『ナノスピンの変換科学研究』  
大谷 義近 (スピントロニクス研究会／東京大学 教授) 1
- (2) 『単結晶中性子回折装置 iBIX による新たな構造生物学』  
日下 勝弘 (水和ナノ構造研究会／茨城大学 教授) 10
- (3) 『カーボンナノチューブの螺旋構造を楽しむ』  
片浦 弘道 (ナノカーボン研究会／産業技術総合研究所 首席研究員) 20
- (4) 『計算生命科学の進展』  
西野 吉則 (バイオ単分子研究会／北海道大学 教授) 30
- (5) 『界面ナノ科学を取り巻く環境』  
一杉 太郎 (界面ナノ科学研究会／東京工業大学 教授) 39

### II. 第11回合同研究会 開催報告

- 『ATI 設立30周年記念』 47  
梶村 皓二 (ATI 理事／産業技術総合研究所 研究顧問)



## スピントロニクス研究会

### ナノスピン変換科学研究

委員長 大谷義近  
東京大学物性研究所 教授

#### 1. 研究構想

これまでのスピントロニクス研究の中で、巨大磁気抵抗効果やトンネル磁気抵抗効果に代表されるスピン依存伝導からスピン流という角運動流の概念が生まれた。さらに最近では、角運動量保存則に基づくスピンを媒介とした、電気、光、音、振動、熱の相互変換現象であるスピン変換に関する研究がスピントロニクス研究の主要部分を占めている。第2期では、このナノスピン変換科学を主題として研究会を企画・開催している。最終的には研究会での議論や情報交換を通じて、スピン変換現象を伝導電子スピン、局在スピン、核スピン、フォトン、フォノンなど多様な粒子・準粒子が複合的に絡み合ったナノスピン変換科学として物理体系を構築することを目指している。2014年から本研究会の会員が中心となって文部科学省科研費新学術領域研究「ナノスピン変換科学」プロジェクトを立ち上げ、密に連携しながら研究会を運営している。

本研究会では、上述のスピン変換物性に関わる研究を磁氣的、電氣的、光学的、熱・力学的スピン変換機能に細分化し、それぞれの分野で世界を先導する我が国の研究者が構成メンバーである。研究会員から選出した企画委員を中心にして、研究会を企画・開催し、幅広い分野から招聘する講演者と密に議論を交わす事により、スピン変換現象を実験と理論の両面から深く理解し、最終的には新しいスピントロニクス機能を提言することを本研究会の目標としている。

このように本研究会は研究に関する議論の場を提供するだけでなく、本研究会のメンバーを含むスピントロニクスにかかわる研究者コミュニティの拠点形成にも学会活動とともに一翼を担っている。2016年度は、このプロジェクト発足の2014年からちょうど3年目となり、中間評価を終えたところである。幸い、参加メンバーの努力のおかげで、高評価を頂いたが、今後さらに本研究会とともに活動を盛り上げていきたい。

#### 2. 2016年度の研究活動の概要

2016年度は、2回の研究会を開催した。第1回は6月2日に、最近スピン変換科学の分野で研究が活発に行われている「界面相互作用を用いたスピン流・電流相互変換物性（実験及び理論）」をテーマにした研究会とした。現在進行中のスピン流・電流変換に関わる実験と理論を対比するようにプログラムを組むことにより、充実した議論を実現することが出来た。

昨年度は、我々の研究会メンバーが大きくかかわっている新学術領域研究の中間評価の年であったためしばらく間をおいてしまったが、年明け 2017 年 2 月 17 日に光誘起スピントリクス現象に注目した第 2 回研究会を開催した。円偏光した光は、一種のスピントリクスとみなせることから、光誘起マグノン伝搬、光・スピントリクス変換や半導体スピントリクスレーザー等の新しい現象に関する紹介が実験と理論の両面からなされ、充実した議論が行われた。以下に両研究会の概要を纏める。

第 1 回 2016 年 6 月 2 日

会場：ガーデンシティ御茶ノ水

テーマ：界面相互作用を用いたスピントリクス・電流相互変換物性（実験及び理論）

13:30-14:15 石井 史之（金沢大学）

「酸化物薄膜・界面における Rashba 効果の第一原理計算」

表面・界面での電場に起因したスピントリクス分裂を引き起こす Rashba 効果は、スピントリクス型電界効果トランジスタなどのスピントリクス応用の観点から、半導体界面（III-V 族量子井戸構造）二次元電子ガス (2DEG) 等において多く調べられてきた。近年、Rashba 効果はスピントリクス-電流変換現象の起源としても注目されている。Rashba 効果の大きな系としては、Bi や Bi 化合物が知られており、Bi 原子の深いポテンシャルに起因した大きな Rashba 係数が報告されている。他方、酸化物は強い内部電場を反映して大きな Rashba 係数を示すと期待されることから、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算手法を用いて、ZnO 薄膜、LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>界面、SrTiO<sub>3</sub>薄膜、Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>薄膜等について、Rashba 係数を系統的に調べた結果が紹介された。

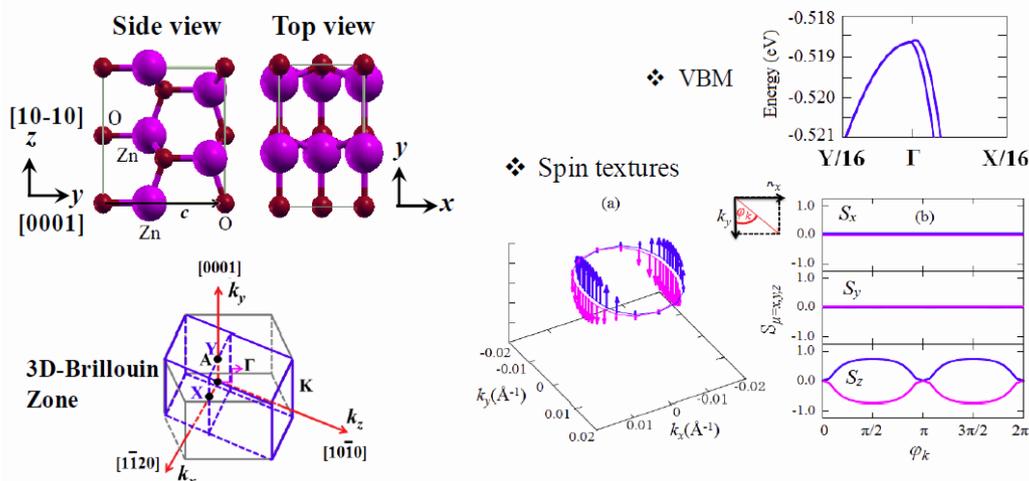
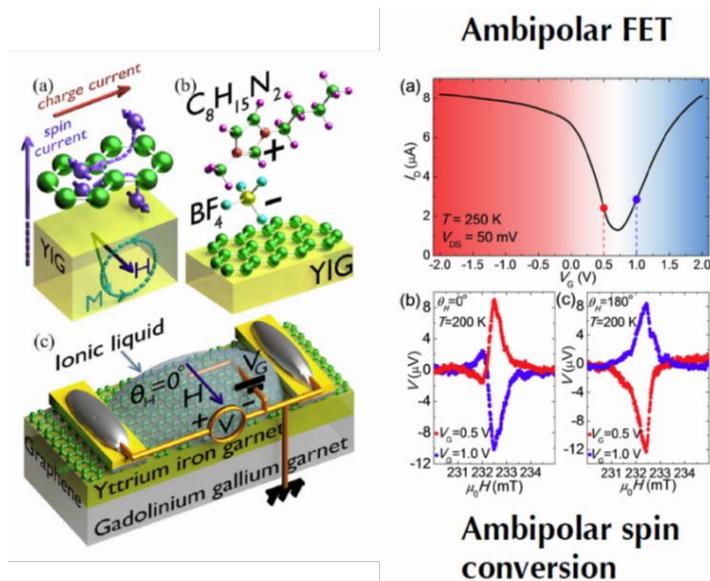


図 1. ZnO の結晶構造と計算によって得られたフェルミ面でのスピントリクス状態

14:15-15:00 白石 誠司 (京都大学)

「重元素・軽元素を用いた表面・界面スピノービトロニクス」

固体中のスピノービ相互作用を活用したスピノービ制御は近年スピノービトロニクスとして大きな注目を集めている。スピノービ相互作用は重い元素ほど顕著になるため、これまではPtやTa、Wなどを中心に研究が進められてきており、更に最近ではトポロジカル絶縁体研究の勃興に伴いBiも大きな関心を集めている。重い元素におけるスピノービトロニクスの好例は逆スピノービホール効果(ISHE)であるが、最近では異種接合界面における強いラシュバ場による逆ラシュバ=エーデルシュタイン効果(IREE)という新しい効果も観測されBi/AgやBi/Cuの系が盛んに研究されている。このIREEは空間反転対称性の破れた場で発現することから必ずしも重元素の導入は必須ではなく、そのため最も軽い元素の一つである炭素からなるグラフェンなどの2次元材料はIREEとISHEの相関を議論する興味深い材料ステージとなりうる。



以上の背景を考慮して講演者が最近取り組んでいるBi/YIG、Bi/Ag/YIG、BiSbTeSe、単層グラフェン/YIG、単層カーボンナノチューブ YIG などの重元素と軽元素という両極端な材料群におけるスピノービトロニクスをテーマに、その物性やスピノービ相互作用によるスピノービ変換機構が紹介された。

15:30-16:15 近藤 浩太 (理研)

「スピノービ分裂した表面および界面状態を用いた電流-スピノービ流変換」

トポロジカル絶縁体表面やラシュバ効果が働く界面では、スピノービ分裂した電子バンドが光電子分光測定により観測されている。近年、このような表面や界面を利用したスピノービトロニクスデバイスが数多く提案され、表面科学・スピノービトロニクスの両分野で注目

を集めている。その中でも、スピントロクスデバイスの駆動源となるスピンの生成を、表面や界面で行う”界面電流-スピン流変換現象(Edelstein 効果)”に着目して多くの研究が行われている。本講演では、界面での電流-スピン流変換メカニズムを紹介されたのちに、最近の結果であるトポロジカル絶縁体の表面状態を用いた電流-スピン流変換とラシュバ効果起因と考えられる金属/酸化物界面における電流-スピン流変換に関する実験結果が紹介された。

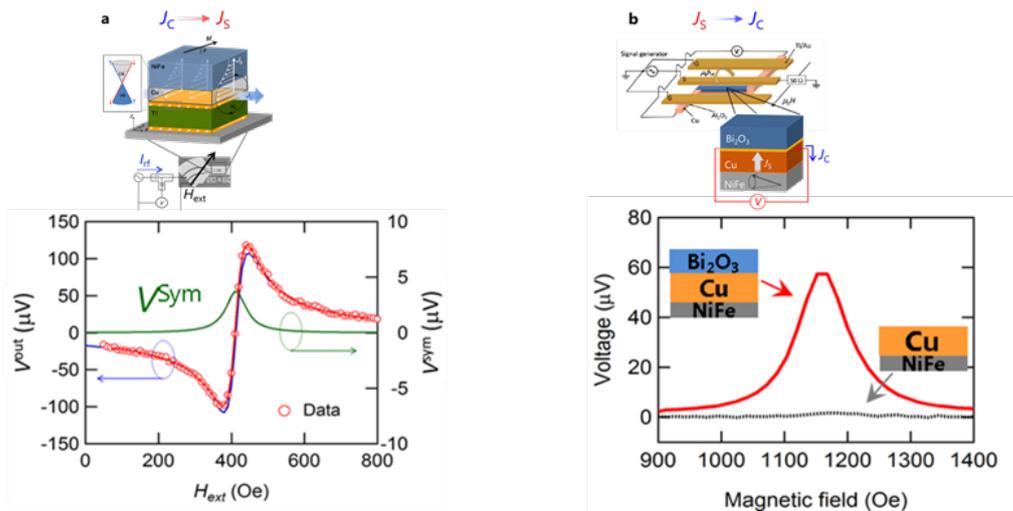


図3 素子構造および界面電流-スピン流変換現象の測定結果 (a) トポロジカル絶縁体を用いた電流-スピン流変換 (b) 金属/酸化物界面におけるスピン流-電流変換

16:15-17:00 大矢 忍 (東京大学)

「エピタキシャル単結晶薄膜およびその接合界面を生かしたスピントロクス」

スピン自由度を生かした新しい半導体デバイスを実現する上で、強磁性体/半導体界面の結晶性を制御して、界面でのスピン散乱を低減させることは極めて重要な課題である。講演者は格子整合性の良い様々なエピタキシャル単結晶強磁性ヘテロ界面の開拓と、それらにおける新規物性探索を行ってきた。まず、そのような界面を実現できるひとつの材料として研究を行っている強磁性半導体について、室温強磁性実現に向けた新規材料の開拓、量子ヘテロ構造で観測された新規物性や、縦型スピントランジスタの基礎動作実証への試み等が紹介された。また、スピン流デバイスへの応用が期待され、半導体と格子整合性の良いトポロジカル結晶絶縁体 SnTe についても、スピンプンピングを用いたスピン注入の研究が紹介された。

第2回 2017年2月17日

会場：ガーデンシティ御茶ノ水

テーマ：多様な光学的スピン変換現象

13:30-14:15 佐藤 琢哉 (九州大学)

「逆ファラデー回転、マグノン伝搬制御」

近年、光パルスを用いた磁化制御が精力的に研究されている。非熱的な磁化制御の方法の一つが逆ファラデー効果を用いたものであり、透明媒質に円偏光パルスを照射することで、媒質中に光線の進行方向に平行に有効磁場パルスが生じ、スピン波が誘起される。有限の大きさを持つ磁性体中では、サンプル端面でのスピン波の反射や磁性体のないギャップを越えるスピン波の伝播などが起こりうる。

講演者は、CCD カメラを用いた時間分解ポンプ・プローブスピン波イメージング法により、光で誘起されたスピン波波束がギャップを透過する様子を時間分解、位相分解してイメージングした。試料として厚さ 110  $\mu\text{m}$  のビスマス添加希土類鉄ガーネット単結晶試料を用いた。パルス幅約 150 fs の円偏光ポンプパルスを用いて逆ファラデー効果によって試料を励起し、時間遅延されたプローブ光パルスのファラデー回転を測定した。幅約 40~350  $\mu\text{m}$  のギャップを持つ試料の左側で励起されたスピン波が右側に透過する様子の詳細な観測結果を基にスピン波の透過率および位相に対するスピン波の波長、ギャップ幅の関係について考察した結果が報告された。

14:15-15:00 小川 直毅 (理研)

「トポロジカル絶縁体の光スピン流生成」

ラシュバ型スピン分裂を示す半導体中やトポロジカル絶縁体の表面状態においては、スピンの向きが運動量に直交するスピン-運動量ロッキング現象が発生する。このような試料系に電流を印可するとスピン蓄積が起これ (Rashba-Edelstein 効果)、トポロジカル絶縁体表面から隣接物質へのスピン流注入などが可能となる。もしこのような電子系の電流をパルス光で制御できれば、原理的にはフェムト秒スケールでの光誘起スピン注入が可能となる。これまで、トポロジカル絶縁体においても円偏光ガルバニック効果を用いた光電流制御が報告され、試料調整による最適化も実証されてきたが、その発生効率は比較的小さな値にとどまっている。講演者等は、トポロジカル絶縁体に磁性元素をドーピングし時間反転対称性を破ることによって、表面のディラック電子状態を変調し(図 4)、より大きな光電流を発生することに成功した。中赤外波長における表面電子状態の選択励起によって、理論予測に近い値の光電流とその磁場制御ができることが示された。表面電子による光電流は光学遷移程度の時間で発生するとされることから、今後、積層デバイスにおいて高速のスピン注入の実証が期待される。

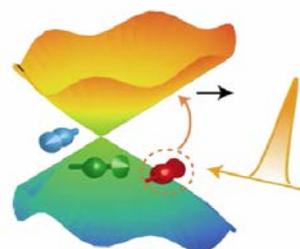


図 4 磁性トポロジカル絶縁体表面における光電流発生の様式図

15:30-16:15 Ka Shen (デルフト工科大学)

「光誘起マグノン伝搬の理論」

超高速レーザー光を強磁性薄膜に照射すると、逆ファラデー効果や熱によって誘起されるコヒーレントな磁化ダイナミクスの理論研究の成果が報告された。講演では、磁気弾性結合を媒介して発生するスピン波とフォノン間の運動変換が角運動量の効率的な伝搬を可能にしていることが示された。その結果、静磁気的な結合の異方性がスピン波伝搬の角度依存性を与えること、特にその形態が熱的なものと比熱的なもので大きく異なることが理論的に示された。実験条件にも大きく依存するが、この理論研究の結果が、これまで未解決の問題とされてきた円偏光誘起超高速磁化ダイナミクスの発現機構を理解する上で重要な役割を果たすことが報告された。

16:15-17:00 揖場 聡 (産総研)

「円偏光で発振する半導体スピンレーザーの開発」

近年、半導体中の電子スピン自由度を積極的に利用した半導体レーザー“スピンレーザー”が注目を集めている。スピンレーザーは円偏光のコヒーレント光を出力できるため、偏光-磁性体磁化間での情報転写や制御、また、カイラル物質のセンシングなど次世代光源として期待が大きい。これらの応用ではレーザー出力光として高い円偏光度( $>0.9$ )が必要であるが、先行研究では低温(50 K)においても円偏光度が0.3程度に留まっていた。高い円偏光度を持つスピンレーザーを実現するためには、磁性電極によるスピン注入部でのスピン注入効率の向上だけでなく、スピン・円偏光変換が行われる活性層のキャリア再結合寿命とスピン緩和時間の比率も重要である。また、一般的な半導体レーザーと同様に活性層として優れた発光特性や表面・界面平坦性も要求される。講演者のグループは活性層の特性向上を目指し、長い電子スピン緩和時間が期待できる(110)

面 GaAs 量子井戸の開発に取り組んできた。その結果、分子線エピタキシー法による系統的な結晶成長実験を通して、一般的な(100)面 GaAs 試料と同程度の表面平坦性を得るとともに、発光特性・スピン特性の大幅な向上を達成した(図5)。本成果により(110)面 GaAs 量子井戸を利用した高性能なスピンレーザーの実現が期待される。

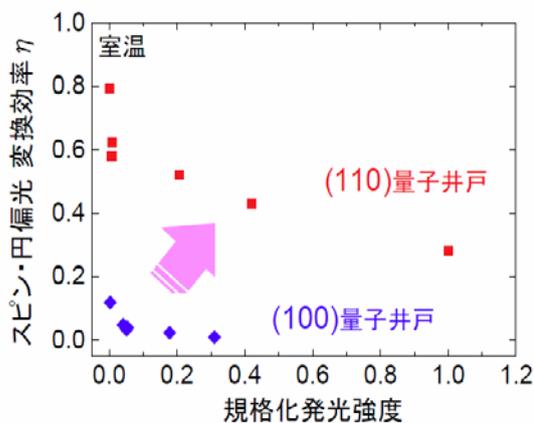


図5 結晶成長条件を変えた試料のスピン・円偏光変換係数と規格化発光強度

### 3. まとめと今後の計画

上述したように、2016年度は2回の研究会を開催した。第1回は6月2日に、最近のスピン트로ニクス分野で研究が活発に行われている「界面相互作用を用いたスピン流・電流相互変換物性（実験及び理論）」をテーマにした研究会とした。現在進行中のスピン流・電流変換に関わる実験と理論を対比するようにプログラムを組むことにより、充実した議論を実現することが出来た。昨年度は我々の委員会メンバーが大きくかかわっている新学術領域研究の中間評価のヒアリングが9月であったため研究会の開催を年内中にすることが出来ず、第2回は年明け2017年2月17日に、光誘起スピン変換現象に注目した研究会を開催した。円偏光は、一種のスピン流とみなせることから、光誘起マグノン伝搬、光・スピン流変換や半導体スピンレーザー等の新しい現象に関する紹介が実験と理論の両面からなされ、活発な議論が行われた。



第1回研究会@ガーデンシティ御茶ノ水の様子

2017年度は、既に4月14日に第1回研究会を「ナノスピン変換科学のこれから」と題して新学術スピン変換科学と共催で、公募研究班の第2期採択課題の発表会として開催した。今後も、可能ならば、新学術の研究会と共催で10月と年明け2月ごろ、合わせて2回のスピン트로ニクス研究会の開催を考えている。このような研究会の開催形態をお認め下さった伊達理事長にこの場を借りて感謝と御礼の意を表す。話題として昨年度網羅できなかった「反強磁性スピン트로ニクス」と「超伝導スピン트로ニクス」の2つのトピックスを考えている。

## 研究会開催記録

【第1回】2016年6月2日（木）御茶ノ水

テーマ：「界面相互作用を用いたスピン流・電流相互変換物性（実験及び理論）」

1. 「酸化物薄膜・界面における Rashba 効果の第一原理計算」  
石井 史之（金沢大学）
2. 「重元素・軽元素を用いた表面・界面スピンオービトロニクス」  
白石 誠司（京都大学）
3. 「スピン分裂した表面および界面状態を用いた電流-スピン流変換」  
近藤 浩太（理研）
4. 「エピタキシャル単結晶薄膜およびその接合界面を生かしたスピントロニクス」  
大矢 忍（東京大学）

【第2回】2017年2月17日（金）御茶ノ水

テーマ：「多様な光学的スピン変換現象」

1. 「逆ファラデー効果を用いたマグノン生成と伝播制御」  
佐藤 琢哉（九州大学）
2. 「トポロジカル絶縁体の光スピン流生成」  
小川 直毅（理研）
3. 「Laser-Induced Spatiotemporal Dynamics of Magnetic Films」  
Ka Shen（デルフト工科大学）
4. 「円偏光で発振する半導体スピンレーザの開発」  
揖場 聡（産総研）

## スピントロニクス研究会員名簿

大谷 義近	東京大学 物性研究所ナノスケール物性研究部門	教授 研究会委員長
前川 禎通	日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター	センター長
大野 英男	東北大学 電気通信研究所	所長・教授
小野 輝男	京都大学 化学研究所 材料機能化学研究系4磁性体化学領域	教授
門脇 和男	筑波大学 藻類バイオマス・エネルギーシステム開発研究センター 兼、数理物質系	副センター長・教授
齊藤 英治	東北大学 材料科学高等研究機構	教授
新庄 輝也	京都大学	名誉教授
鈴木 義茂	大阪大学大学院 基礎工学研究科物質創成専攻	教授
高梨 弘毅	東北大学 金属材料研究所	所長・教授
永長 直人	理化学研究所 創発物性科学研究センター	副センター長・教授
木村 崇	九州大学 大学院 理学研究院 物理学部門	教授
福岡 康裕	九州工業大学 若手研究者フロンティア研究アカデミー	准教授
三谷 誠司	物質・材料研究機構 環境・エネルギー材料部門	グループリーダー
白石 誠司	京都大学大学院 工学研究科電子工学専攻	教授
安藤 康夫	東北大学大学院 工学研究科応用物理学専攻	教授
水上 成美	東北大学 材料科学高等研究機構	教授
多々良 源	理化学研究所 創発物性科学研究センター	チームリーダー
大岩 顕	大阪大学 産業科学研究所	教授
村上 修一	東京工業大学 理学院物理学系	教授
新見 康洋	大阪大学大学院 理学研究科 物理学専攻	准教授

2017年3月現在

## 単結晶中性子回折装置 iBIX による新たな構造生物学

委員長 日下 勝弘

茨城大学フロンティア応用原子科学研究センター 教授

### 1. 研究構想と概要

サブナノメートルレベルで生体内機能を制御するタンパク質等の周りには、非常に多様な形で水が存在する。あるものは安定に水和し、あるものは運動し、そしてあるものはイオンの形で存在する。タンパク質や核酸 DNA のように特定の大きな構造を持つ生体高分子と比べて、地球上ではありふれた小さな分子である水が、生体高分子とどのように相互作用をして生命活動を成立させているかは、未知な部分が多い。たとえば、タンパク質や DNA が機能する直前の分子認識における水の役割、化学反応中の状態における水の関与したプロトンや水分子自体の授受および水素結合の形成・解消、そして反応後の水の脱離やタンパク質・DNA 分子への再水和・再配置、さらには膜タンパク質のプロトンポンプ機構におけるプロトン等の授受での水の役割のように、生体機能の中において、ナノスケールで絶えず揺らぎながら重要な役割を、黒子のようには果たしている。最近では、膜タンパク質などの複雑な系での水の振る舞いなどが注目されており、水素原子位置情報はますます重要視されている。

このような水和ナノ構造の解明には、水素位置決定を得意とする中性子回折法が重要な役割を担い、大強度陽子加速器施設 J-PARC の積極的利用によって加速されることが期待される。現在、生体高分子の中性子構造解析は、米国の中性子源施設 SNS においても、生体高分子解析専用のビームラインが本格的な稼働を開始し成果を出しつつある。また、ヨーロッパにおいても日本、米国に続いて次世代中性子源 ESS の建設が開始しており、生体高分子回折装置の設置が最優先の目標の一つとされており、その必要性が世界的に認識されていることが伺える。日本の中性子源施設 J-PARC, MLF において、先行して開発・運用されてきた中性子回折計（茨城県生命物質構造解析装置 iBIX）は、今後 1 MW の最高出力を迎え、各種酵素とその基質との複合体や膜タンパク質も含めた水和構造に関して、プロトネーションも含めた機能に直結した水や水素位置構造の解明を目指しており、既に中性子の特徴を生かした成果が出始めている。さらには、生命学のさまざまな場面で用いられる X 線や NMR, 赤外線, 計算科学等との相補的な利用により生命科学分野において重要な知見をもたらすことが期待されている。

本研究会では、上記 iBIX のソフトウェア改良や必要な大型結晶育成法も含めて、さまざまな実験分野のほか、計算科学研究者にも生体高分子中の水やプロトネーション

について議論を深めてもらい、関連分野の飛躍的な発展を狙う。

本研究会は 2015 年度から前研究会の基本的なコンセプトを引き継ぎ、日下が委員長となり活動を継続しており 2016 年度は 2 年目となる。会員は 1 名が 2015 年度末に辞退され、それ以外の 14 人は継続している。2015 年度の本研究会において発表をお願いし、活発な議論を行っていただいた茨城大学の海野教授に 2016 年度から新たな会員に加わっていただいた。

J-PARC の中性子回折装置 iBIX は 2012 年度に検出器の増強と高度化が行われ、本格的なタンパク質試料への共用を開始した。しかしながら、東日本大震災、ハドロン実験施設における放射性物質漏洩事故、中性子源ターゲットの冷却水漏洩等で度々運転停止を余儀なくされ、一度は加速器出力 500kW での運転がなされていたが、現在は新たなターゲットの開発・導入までは旧型のターゲットを用いた低出力の 150kW での運転となっている。現状の中性子によるタンパク質の回折実験においては、中性子源の出力が測定効率と直結しており、昨年度からはタンパク質の測定数が制限されている。その数少ない測定数の中でも共用実験は着実に進められており、有効なデータ測定が実施できている。iBIX は計画時の目標として、既存の中性子回折計 (BIX-3, 4, JRR-3M, JAEA) の 50 倍の測定効率を有し、 $135 \times 135 \times 135 \text{ \AA}^3$  の格子体積のタンパク質結晶の測定が可能であることとしていた。50 倍の測定効率を有することはタンパク質標準試料の測定により 2012 年度に実証済みで、加速器出力 1MW 時には  $2 \text{ mm}^3$  の試料が 2~4 日程度で測定可能であることが分かっていた。2016 年度には、装置グループの一員が、 $133.3 \times 133.3 \times 133.3 \text{ \AA}$  の格子体積をもつタンパク質試料の大型結晶育成に成功し、iBIX を用いて  $2.4 \text{ \AA}$  分解能の中性子回折データを取得し、構造解析まで成功した。これにより、iBIX は測定効率、測定可能格子体積、測定可能分解能について、目標通りの性能を達成していることが実証され、加速器出力が 1MW になれば、世界最高性能の生体高分子用単結晶中性子回折装置となることが分かっている。2017 年度の夏には不具合が修正された新たなターゲットへの交換が予定されており、現在の 2 倍の 300kW での運転再開が予定されている。さらに、2018 年の 1 月には 500~600kW への出力増強も予定されてる。iBIX 自身の高度化についても、検出器の測定効率を向上させるために、検出器の増強や検出器の感度向上のための開発を進めている。加速器出力の増強と iBIX 自身の高度化が進めば、これまでに中性子では測定対象とはならなかった試料の測定が行える状態に移行することができ、この分野の飛躍的な発展が期待できると考えている。

## 2. 2016 年度の研究活動の概要

2016 年度は、水和ナノ構造研究会単独、および水和ナノ構造・バイオ単分子合同研究会を開催した。またこれに加えて、生体高分子用中性子回折計 iBIX の運営母体である茨城県が中心となっている中性子産業利用推進協議会が主催する生物構造学研究

会、および茨城県中性子利用促進研究会が主催する iBIX 研究会との共催がそれぞれ 2 回、4 回あり、合計で 8 回の研究会が実施された。

## 2.1 第 1 回水和ナノ構造研究会

(2016 年 10 月 4 日 (火), 東京 ATI 会議室)

第 1 回水和ナノ研究会は東京都の ATI の会議室にて行われた。外部講師 4 名をお迎えし「生体反応に関わるプロトンを捉える」というテーマで開催した。

1 人目の外部講師は、佐賀大学の海野雅司氏で、「ラマン円偏光二色性分光を用いた光受容タンパク質の構造解析」というタイトルでご講演頂いた。振動分光方法は分子構造や分子の周辺環境に関する有用な情報を与えてくれる。光受容タンパク質のような活性中心として色素分子を含んだタンパク質へも応用可能な視光励起に加え近赤外励起のラマン光学活性分光装置を独自に開発した。バクテリオロドプシン、Photoactive Yellow Protein 等にこの手法が応用され、発色団の面外方向への歪みなどの発色団の構造を捉えることができ、その事例が紹介された。結晶構造解析とは相補的な役割を果たし得る手法として非常に興味深い結果であった。

2 人目の外部講師は京都大学の金賢得氏で、「水素核の量子性を取り入れた量子分子動力学法の構築と、水および水素凝縮相の未知物性の発見と解明」というタイトルで発表いただいた。発表者は、水素の核だけでなく電子も同時に波束化し、クラスターから高圧固体まで幅広い水素凝縮相への適用が可能な量子分子動力学法と呼べる手法を開発した。本発表では、液体水における半量子分子動力学法での経験や、水や水素の凝縮相において、水素核の量子性がどのような役割を果たしているかについて議論がなされた。本研究会ではタンパク質における水素、水、プロトネーションにおける情報について議論を行ってきている。中性子や X 線での実験的手法ばかりでなく、シミュレーションも重要な役割を担うと考えている。発表者が開発された量子分子動力学法のような非常に精密なシミュレーションの知見が、タンパク質などの大きな分子の機能やダイナミクス理解に応用されることが期待される。

3 人目の外部講師は大阪大学の岡島俊英氏で、「銅アミン酸化酵素の反応中間体構造と中性子構造解析の現状」というタイトルで発表いただいた。銅アミン酸化酵素は、各種の一級アミンを酸化的脱アミノ化する酵素である。本酵素のユニークな点は、補酵素 TPQ は特定のチロシン残基から、酵素の自己触媒的な酸化反応によって作り出されていることであり、単一回転の補酵素形成反応と多回転の触媒反応の二機能性酵素であり、二つの解析すべき反応機構がある。両反応に対して、反応中間体構造を決定し、反応速度論的な解析とあわせ、詳細な分子機構を明らかにすることを目指し、補酵素あるいは中間体が、2つのコンフォメーションを切り替えながら効率的に反応を進行させていることが明らかになったと紹介された。また、反応におけるプロトン移

動を可視化するため、茨城県中性子ビームライン iBIX において本酵素の中性子回折にも取り組んでおり、非常に大型で良質な結晶化に成功している。iBIX で参加型 AGAO の中性子構造解析用のデータの測定がすでに行われており、約 1.7 Å 分解能のデータを取得し構造解析に成功している。中性子回折の特長を活かした解析結果が得られており、今後、中間体構造を含めた中性子構造解析による反応機構の解明が期待される。

iBIX では加速器出力の増強により、より幅広いタンパク質での測定が行われることが予想される。これらが活発に進むためには、大型で良質な結晶の育成が非常に重要である。そこで 4 人目の外部講師として、X 線での良質なタンパク質結晶化について (株) コンフォーカルサイエンスの田仲広明氏に講演をお願いした。「タンパク質結晶化の技術—CS/MF での取り組み—」というタイトルで発表頂いた。結晶化向けのタンパク質試料では、その均一性と結晶生成の成否、あるいは得られた結晶の良否との間には、高い相関があることが経験的にわかっており、SDS-PAGE、Native-PAGE、2 次元電気泳動、高分解能イオン交換クロマト、動的光散乱による試料の評価により、精製過程の見直しや、より分離の良いクロマトによる精製の適用で試料性状を改善することができることが紹介された。タンパク質の結晶化は、タンパク質分子表面への溶媒分子のアクセスが低下することと密接な関係があり、タンパク質の結晶生成では、タンパク質分子が持つ電荷を中和するようなカウンターイオンの存在が重要であることが紹介された。中性子回折に適する分解能の高い大型の単結晶の作成に関しては、現在経験の蓄積を進めているところであるとのことだが、X 線解析向けのタンパク質結晶化に関する知見は大型結晶育成にも非常に有用であり、これらの経験が大型結晶育成に反映され経験が蓄積されていくことが望まれる。

全てのご講演で会員を交えて非常に活発な議論が交わされ有意義な研究会となった。



第 1 回研究会の様子

## 2.2 水和ナノ構造・バイオ単分子合同研究会

(2017年3月27日(月), 東京都ソラシティーRoom D)

第2回の水和ナノ構造研究会はバイオ単分子研究会と合同で開催された。場所は東京都ソラシティーで、「タンパク質ダイナミクスへの多角的アプローチ」というテーマで開催した。両研究会で各々2名の外部講師をお招きした。本報告では、本研究会側からお招きしたお二人の講師の発表について報告する。

1人目の外部講師は、理化学研究所の上坂友洋氏で、「トリプレット DNP ～高温・低磁場での核偏極生成とタンパク質研究における展望～」というタイトルでご講演いただいた。固体中で核偏極を生成する標準的な技術として、電子の熱偏極を原子核に移行する、いわゆる動的核偏極(DNP)法がよく知られている。この手法を応用し、タンパク質内の水素を偏極することで水素の散乱長を増大させ、水素由来のバックグラウンドを低減させることにより水素原子の感度を上げるという手法に iBIX グループは着目してきたが、タンパク質単結晶を極低温かつ高磁場下に置くことは非常にハードルの高いものであると認識していた。発表者のグループはペンタセン分子を用いた新しい DNP 法である「トリプレット DNP 法」を開発している。この手法では、電子の熱偏極を用いず、ペンタセン分子の光励起三重項状態に生じる電子偏極を用いている。この電子偏極が温度にも磁場強度にも依存しないという特徴を活かすと、従来型 DNP 法が苦手としている、常温を含む高温、1 テスラを遥かに下回る低磁場での偏極生成が可能となる。実際には極低温を作る装置が必要なく、液体ヘリウムを必要とせず、生体高分子にやさしい条件で核偏極の増大ができる。まだまだ萌芽的な技術であるとのことであり、ペンタセン分子をタンパク質単結晶内に導入する方法等まだまだ乗り越えるべき壁はあると思われるが、タンパク質の核偏極法を検討する我々にとっては非常に興味深く、新たな可能性を感じる講演であった。

2人目の外部講師は奈良先端科学技術大学の廣田俊氏で、「金属タンパク質の構造変化：活性部位の構造変化とタンパク質の超分子構造体形成」というタイトルで発表いただいた。自然界には、最も単純な化学反応である水素分子の合成・分解 ( $2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightleftharpoons \text{H}_2$ ) を極めて効率的に行う酵素であるヒドロゲナーゼが存在する。[NiFe]ヒドロゲナーゼには様々な状態が存在し、不活性状態と活性状態の2状態に大別される。触媒反応が起こる時、水素分子の合成・分解により[NiFe]活性部位の配位構造は3つの活性状態を行き来する活性化サイクルを形成することが知られている。本講演では活性化サイクルの新しい中間体の検出と本酵素の光活性化の成功について紹介された。また、新しい生体分子技術の観点から注目されているタンパク質の超分子化について、タンパク質分子間で同一構造領域を交換するドメインスワッピングにより、シトクロム *c* が多量体を連続的に形成し、ポリマー化する機構を明らかにした例をご紹介頂いた。生体を構成するタンパク質は、有機化合物に比べ高い生体適合性を示すため、タンパク質から成る超分子は新しい生体適合性に優れた機能性材料となりうるものである。

新たな超分子の機能の機構解明に中性子回折が適用される等の今後の相互発展を期待したい。



合同研究会の様子

## 2.4 共催による研究会

その他、共催で開催された6研究会の概要を以下に示す。

### 2.4.1 平成28年度茨城県 iBIX 研究会:

第1回 iBIX 研究会 平成28年5月20日

庄村 康人氏 (茨城大学)

「L-アミノ酸リガーゼの基質特異性と反応機構の解明」

第2回 iBIX 研究会 平成27年8月29日

樋口 芳樹氏 (兵庫県立大学)

「[NiFe]ヒドロゲナーゼの触媒反応機構の解明」

第3回 iBIX 研究会 平成27年12月7日

原 利明氏 (大阪大学) / 杉山 成氏 (大阪大学)

「脂肪酸結合タンパク質を用いたタンパク質-リガンド-水の構造機能と相互作用の解明」

第4回 iBIX 研究会 平成28年3月9日

山田 太郎 (茨城大学)

「セリンタンパク質分解酵素の中性子回折による反応機構の解明」

\*開催場所はいずれも茨城県東海村いばらき量子ビーム研究センター

### 2.4.2 中性子産業利用推進協議会 構造生物学研究会:

平成28年度第1回生物構造学研究会

『構造生命科学の最前線と医薬品産業総合戦略の展望1』

(平成28年9月2日(金), 研究社英語センター大会議室)

「iBIXの現状と利用成果」

日下 勝弘 (茨城大学)

「一本鎖核酸を認識する Tol1 様受容体の構造科学的研究」

清水 敏之 (東京大学)

- 「システムズバイオロジーを指向した構造生物学的手法の開発」  
上久保 裕生 (奈良先端科学技術大学院大学)
- 「自由電子レーザー SACLA を用いた構造生物学」  
岩田 想 (京都大学大学院医学研究科)
- 「インフルエンザウイルスの細胞内増殖機構」野田 岳志 (京都大学ウイルス研究所)
- 「薬剤耐性を克服する抗菌薬創出に向けた結晶構造解析」  
山田 雅胤 (Meiji Seika ファルマ)
- 「Unstructured/Structured 相互作用を標的にした創薬」  
小路 弘行 (株PRISM BioLab)
- 「レニン阻害剤の Structure-based drug design」高橋 瑞稀 (第一三共 RD ノバーレ)

### 平成 28 年度第 2 回生物構造学研究会

『構造生命科学の最前線と医薬品産業総合戦略の展望 2』  
(平成 29 年 3 月 29 日(水), 東京都新宿区研究社英語センター、大会議室)

- 「茨城県生命物質構造解析装置 iBIX の現状と利用成果」 日下 勝弘 (茨城大学)
- 「カルシウムポンプの構造生物学 - 磷脂質との相互作用」 豊島 近 (東京大学)
- 「PF 小角散乱ビームラインにおける BioSAXS 測定解析」 清水 伸隆 (KEK/PF)
- 「生命科学におけるコヒーレント X 線回折イメージングの展開」  
中迫 雅由 (慶応大)
- 「医薬品産業に新風を吹き込むバイオベンチャーの活躍」 松本 正 (レクメド)
- 「臓器線維症に対する siRNAHSP47 を用いた治療法の開発」  
新津 洋司郎 (札幌医科大学)
- 「脳梗塞を標的とした DDS 製剤の開発」 奥 直人 (静岡県立大学)
- 「DDS 技術による創薬：企業の観点から見たその重要性」 菊池 寛 (エーザイ)

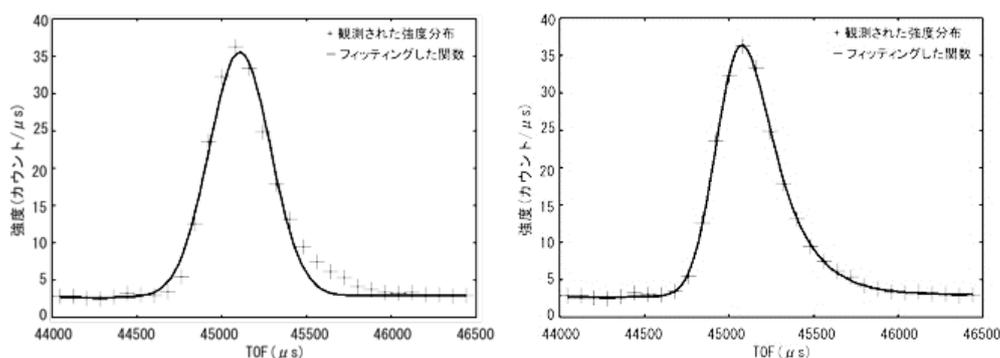
## 3. 研究成果とトピックスなど

iBIX は、飛行時間型単結晶中性子回折計であり、白色中性子を用いた測定を行っている。また、タンパク質の非常に弱い中性子回折強度データから可能な限り高い精度で積分強度を抽出する必要があるため、これまでデータ処理法で様々な工夫を行ってきた。その一つとして新たな積分法を開発し高精度な積分を実現することができるようになったので、これをトピックスとして取り上げる。

### 3.1 積分精度の向上-プロファイルフィッティング法の開発

【概要】回折能の低いタンパク質の TOF 回折データから高精度に積分強度を抽出することができるプロファイルフィッティング法を開発し、積分精度及び構造精密化の精度を向上することに成功した。

iBIX は飛行時間法により単結晶中性子回折データを測定する装置である。回折能の低いタンパク質単結晶の中性子回折データから水素原子やプロトンの構造を最大限に引き出すためには、弱い反射の積分強度を高精度に抽出する必要がある。測定した TOF 回折データから、可能な限り精度の高い積分強度データを抽出するためのデータ処理手法としてプロファイルフィッティング法を用いた積分強度抽出法の開発を行った。iBIX はタンパク質の弱い回折強度を測定するためにビーム強度を優先し、結合型減速材のビームラインに設置されており、得られた中性子回折データの TOF 方向の強度分布は非結合型減速材のものとは比べて非対称性の高いものである。そこで、iBIX で測定された中性子回折データに対して、既存の非対称な TOF プロファイル関数を複数検索した。粉末結晶用データ処理プログラム GSAS で用いられている指数関数とガウス関数を畳み込んだ関数（図 14 右）が強度分布との一致がよく（対称なガウス関数ではテールが一致しない図 14 左）、パラメータ数も少ないため（5 個）、最も適した関数と判断した。弱い反射の積分強度をプロファイルフィッティング法により求めるアルゴリズムを考案し、プログラムを試作した。タンパク質試料の解説データに対してプロファイルフィッティング法を適用した。従来の Summation 法と強度データの等価反射の一致度  $R_{\text{merge}} \cdot R_{\text{pin}}$ 、構造精密化後の信頼度因子  $R_{\text{work}} \cdot R_{\text{free}}$  を比較したところ、高分解能領域で改善がみられた。標準的な試料である、リボヌクレアーゼ A の場合、 $R_{\text{merge}}$  が最も強度の弱い回折点群で 37.5% から 28.0% と絶対値で 9.5% 向上した。開発したプロファイルフィッティング法は回折データ処理ソフト STARGazer に実装され、ユーザーが容易に利用できるようになっており、現在はマニュアルとともにユーザーに対して配布が可能である。本成果はプレス発表を実施している。



横軸 TOF の非対称な強度分布に関数を非線形最小二乗法でフィッティングした結果  
 左) 対称なガウス関数（テールが一致しない）  
 右) ガウス関数と指数関数を畳んだ非対称関数

#### 参考文献

“Application of profile fitting method to neutron time-of-flight protein single crystal diffraction data collected at the iBIX “

Naomine Yano, Taro Yamada, Takaaki Hosoya, Takashi Ohhara, Ichiro Tanaka & Katsuhiro Kusaka

Scientific Reports 6, 36628(2016)

## 研究会開催記録

【第1回】2016年10月4日（火）御茶ノ水

テーマ： 「生体反応に関わるプロトンを捉える」

1. 「ラマン円偏光二色性分光を用いた光受容タンパク質の構造解析」  
海野 雅司（佐賀大学）
2. 「水素核の量子性を取り入れた量子分子動力学法の構築と、  
水および水素凝縮相の未知物性の発見と解明」  
金 賢得（京都大学）
3. 「銅アミン酸化酵素の反応中間体構造と中性子構造解析の現状」  
岡島 俊英（大阪大学産業科学研究所）
4. 「タンパク質結晶化の技術 –CS/MFでの取り組み–」  
田仲 広明（(株) コンフォーカルサイエンス）

【第2回】2017年3月27日（月）御茶ノ水

バイオ単分子研究会との合同研究会

テーマ： 「タンパク質ダイナミクスへの多角的アプローチ」

1. 「トリプレット DNP ～高温・低磁場での核偏極生成と  
タンパク質研究における展望～」  
上坂 友洋（理研仁科加速器研究センター）
2. 「金属タンパク質の構造変化：活性部位の構造変化とタンパク質の超分子構造体形成」  
廣田 俊（奈良先端科学技術大学）
3. 「X線溶液散乱と分子動力学計算でみるタンパク質の動的構造と水和構造」  
佐藤 衛（横浜市立大学）
4. 「放射光 X 線と結晶プローブを用いた水溶液中・局所ダイナミクス計測」  
関口 博史（高輝度光科学研究センター）

## 水和ナノ構造研究会員名簿

日下 勝弘	茨城大学 フロンティア応用原子科学研究センター	教授 研究会委員長
田中 伊知朗	茨城大学 工学部	教授
新村 信雄	茨城大学 フロンティア応用原子科学研究センター	特命研究員
五十嵐 圭日子	東京大学大学院 農学生命科学研究科	准教授
茶竹 俊行	京都大学 原子炉実験所	准教授
秋山 良	九州大学大学院 理学研究院	准教授
今野 美智子	茨城県	産業利用コーディネーター
矢野 直峰	茨城大学 フロンティア応用原子科学研究センター	産学官連携助教
横山 武司	富山大学大学院 医学薬学研究部	助教
石北 央	東京大学 先端科学技術研究センター	教授
重田 育照	筑波大学 計算科学研究センター	教授
富田 賢一	株式会社ヴィジブルインフォメーションセンター	主任研究員
高野 和文	京都府立大学 大学院生命環境科学研究科	教授
山田 貢	宇宙航空研究開発機構	開発員
海野 昌喜	茨城大学大学院 理工学研究科	教授

2017年3月現在

## カーボンナノチューブの螺旋構造を楽しむ

委員長 片浦 弘道  
産業技術総合研究所 首席研究員

### 1. 研究構想

ナノカーボンとは、少なくとも1次元方向の大きさが100ナノメートル以下の炭素材料であり、「ナノ」が引き出す魅力的な物性を示す。特に炭素sp<sup>2</sup>ネットワークは構造柔軟性が高く、フラーレン（0次元）、ナノチューブ（1次元）、グラフェン（2次元）等、多彩な新材料群が見出され、その優れた基礎物性から次世代半導体材料などとして期待されている。これらナノカーボン材料の合成・精製技術の近年の進展は著しく、特定の原子配列の構造体の合成や分離精製も可能になってきており、その物性解明も進みつつある。しかし、多彩な物性の本質的な理解にはたどり着いておらず、それ故にその応用展開も制限されている。

本研究会では、この魅力的なナノカーボン材料に焦点をあわせ、その基礎物性の理解から応用技術展開まで、既存の分野カテゴリーにとらわれること無く、広く調査研究を行い、科学・技術の発展への貢献を目指す。構成会員を中心に、招待講演者も加えた研究会を開催し、討論に十分な時間を確保することにより、通常の学術集会では得られない熱い議論と深い理解の機会を提供する。気鋭の若手研究者の積極的参加を促し、ナノカーボン材料研究のさらなる発展を目指す。

### 2. 2016年度の研究活動の概要

ナノカーボン材料の研究が大きく広がった要因の一つが、カーボンナノチューブ（CNT）の発見である。1991年に多層のCNTが報告され、1993年に単層CNTが報告された。つまり、2016年は発見から1/4世紀（25年）の記念すべき年である。これまでも、10周年、20周年を記念した国際会議が開催されてきたが、2016年も国際会議CNT25が開催された。この会議の発起人は、当ナノカーボン研究会の会員の一人である、東工大の斎藤晋先生である。ナノカーボン研究会として、本会議を国際フォーラムとして位置づけ、ATIから運営費の援助をいただいた。

さて、CNTには、さまざまな構造異性体があることは良く知られているが、いわゆるカイラル型と呼ばれる構造では、その螺旋の巻き方により、右巻きと左巻きの2種類が存在する。これらは、一般的なキラル分子と同様に、エネルギー順位などは全く同じであり、応用上はほぼ同一の物質として取り扱うことができる。そのため、これまでこれらの差異が大きく取り上げられることは無かった。しかし、右巻きと左巻きで大きく

異なる性質があり、それが円二色性 (Circular Dichroism: CD) である。円二色性とは、右回り円偏光と左回り円偏光の吸光度の差の事である。CNT は円周方向の運動量は量子化されており、軸方向の運動量のみが任意の値をとることができる、1次元物質である。そのような視点に立てば、電子状態に右巻きも左巻きも無い。しかし、右巻き左巻きを分離することは実験的には可能で、分離した試料の CD を測定すると有意な信号が観測される。非常に不思議な話である。この CD の観測を巡る問題で、ナノカーボン研究会では、昨年度、安食先生をお招きして、CNT の光学遷移の選択則について講演していただいた。非常に勉強になる講演であったが、CD の謎を解くには至らなかった。しかし、今年度、ついに東北大学の齋藤理一郎先生がこの謎を解き明かした。難しい理論は私には説明困難であるが、要するに CD は CNT の3次元構造から出てくる信号だという事がわかった。もちろん、3次元構造に由来しなければ、右巻きと左巻きの差が出るはずも無いのだが、これまでの理論的取り扱いはこれを無視していたとの事だ。道理で論文を読んでもさっぱりわからなかったはずである。齋藤先生によりこの CD 信号の理論的バックグラウンドがはっきりしたおかげで、観測される CD 信号の基礎的な規則性が初めて明らかになった。どのような条件で正の信号が観測されるのか、その相対強度はどうなるのか、いくつかの重要な規則が明らかになった。これは、新たな世界の幕開けである。この規則を、実験結果に適用し、解析したところ、世界で初めて CNT のバンド構造を実験的に解析することに成功したのだ。

天然高分子が一方の巻き方しか持たないというこの自然界のミステリアスな特徴を使って、実験的に CNT の右巻き・左巻き分離を実現したが、これまでその CD の解析は困難であった。しかし、ようやく理論的にその謎が解き明かされた今、光学遷移に関する詳細な解析が可能になった。重要なことは、選択則の違いである。1次元電子状態による光学遷移では、CNT 軸に垂直な電場に関する光学吸収を観測することは原理的に極めて困難であった。しかし、3次元構造由来の信号である CD には、軸方向の光学遷移も垂直方向の光学遷移も同様に観測される。つまり、光学遷移に関するほぼすべての情報を得ることができる。これは、とりもなおさず、CNT のバンド構造を調べることができることを示している。だからと言って簡単なことではないが、高純度分離と精密解析により、CNT のバンド構造の解析が可能になった。これまで、第一原理計算でしか見られなかった、価電子帯と伝導体の非対称性も、CD には明確に表れている。こうして、二年越しで展開されたナノカーボン研究会内共同研究は、晴れて実を結び、Nature communications (vol. 7, 12899, 2016) 誌に掲載された。人が集まり、議論をし、興味深い内容を共有する事が重要である、という事の一つの例となれたのではないだろうか。

そのほか、2015 年度から新規加入の名大野先生と 2016 年度から加入の富士通の大淵先生、そして委員長の私で CREST の課題に応募し、無事採択された。環境発電のテーマである。同領域にはナノカーボン材料を使った他の研究テーマが複数採択されて

いるが、大野先生のテーマは異色を放つ。これもナノカーボン研究会から発信した新たな提案とも解釈できる。まだ研究はスタートしたところであり、この提案が大きな展開をみせるかどうか、しばらくお待ちいただきたい。

以上、2016年度の活動状況を個人的希望を交えておおまかに述べた。基礎物性研究に終始していた時期を抜け、ナノカーボン研究は確実に応用分野に進展しつつある。その一方で、物性がすべて解き明かされたのかといえ、残念ながらそうではない。ナノカーボン研究会発の提案が、一歩進んだ物性研究やそれをベースにした応用展開につながることを目指し、期待したい。

以下、2016年度の具体的な取り組みについて報告する。

### 3. 研究成果とトピックス

#### 3. 1 蔵王 2016

齋藤前委員長が始めた若手育成を主眼とした、蔵王での研究会である。2015年度は委員長である私の個人的な事情で開催を見送ったが、多方面からの要望が強かったため、2016年度に再開することとした。まさに、ナノカーボン研究会夏の学校的研究会である。開催場所は、これまで通り瑠璃倶楽リゾートで（7月19日～20日）開催した。東北大の生協にお願いすると、割安で利用できる。仙台駅から宿のバスによる送迎があり、いろいろと便利である。遠く名古屋から参加の先生には、ちょっと大変な思いをさせてしまったが、移動は午前中にすませ、宿で昼食を食べた後、午後から非常にタイトなスケジュールで研究会を開始した。この研究会では、会員の先生方だけでなく、大学院生やポスドク、大学への来訪者など、多数の参加者に発表していただくことになっている。そのため、プログラムは非常にタイトになるが、若手の勢いも手伝って、非常に活発な議論が展開される。しかし、いくら白熱した議論でも、夕方にはきっちり終了する。夕食までの時間を使い、各自思い思いの時を過ごすためだ。我々は、宿からちょっと足を延ばし、露天風呂に浸かってきた。森の木々に囲まれた、自然感あふれる露天風呂で、足を浸して風に吹かれながら、長時間議論をされていた会員の先生方もいらっしやう。この時間が非常に重要である。会議室で繰り広げられる議論も重要であるが、露天風呂で、文字通り裸で交わす議論は、他に代えがたい貴重なものである。まだお酒も入っていないが、温泉効果で妙に血の巡りの良い状況で交わす議論。さぞかし、得るものがあったに違いない。実は私、温泉は嫌いではないが、カラスの行水で、長風呂の議論はちょっと無理である。しかし、体力のある比較的若い会員の先生方は、極めて長時間露天風呂ディスカッションを展開していたようだ。

さて、楽しい夕食後にはナイトセッションがスタートした。多少アルコールも入っているが、それだけに白熱するセッションである。そしてセッション終了後も懇親会が続くという、実に濃密な一日であった。翌日、さらに午前中のセッションがある。昼食後、帰路につくまでの数時間も無駄にしない。私はポスドクとともにロープウエーで山頂を

目指し、先行グループと合流した。希薄な空気と二日酔いと過度な運動で、思わず吐きそうになったが、山頂の駅でソフトクリームを食べて事なきを得た。



参加者集合写真

さて、楽しんだことだけでなく、研究会のサイエンティフィックな内容にも触れなければなるまい。この研究会の発表は英語で行うことになっている。海外からの参加者が多いからである。今回の参加者は総勢38名、海外からの参加者も12名と多かった。中には大学院生もおり、まだ英語の発表には不慣れかと思っただが、予想以上に上手に発表しており、最近の若者の英語力に驚ろかされた。会員の先生方も、限られた時間ながら、非常に興味深い内容の報告をしていただいた。名大の大野先生には、CNTを使ったバイオセンサーの話題をお話しいただいた。ドーパミンを超高感度で検出するということである。非常に興味深い。ロードバイクでスピードを出すと、ドーパミンが大量に分泌されると聞いたことがある。それゆえ、のめり込むらしいが、皮膚に装着したドーパミンセンサーがリアルタイムでサイクルコンピュータにドーパミン量を送信できたら、トレーニングの仕方も変わるかも知れない。同じく名大の北浦先生には、グラフェンを用いたマイクロセルの話をしていただいた。2枚のグラフェンに挟まれた水の構造を透過型電子顕微鏡で観察するという話題を以前ご発表いただいたが、それをさらに高度化するため、Si基板上にグラフェンを乗せ、その上にリソグラフィーを用いて試料室を作製し、さらにその上にグラフェンをのせて蓋をするというものである。液体を電子顕微鏡で観察するのは極めて困難であるが、この試料室があれば、いろいろ面白い観察が可能になると思われる。ナノ空間に閉じ込められた水の挙動は、生命科学ともかかわる非常に面白い分野であり、その観察にグラフェンが寄与するというのは非常に興味深い。東北大の齋藤先生からは、冒頭に書いた通り、CNTのCDに関する理論計算の

進展が報告された。これまで誰も計算できなかった理由とそれを打ち砕くアイデアと、実際の計算の大変さが伝わってくる講演で、非常に勉強になった。実際の CD スペクトルの計算例も示された。産総研の湯田坂先生からは、CNT を蛍光マーカーとして用いる近赤外バイオイメージングの話題が提供された。体内を透過して見るというのは、医療分野の研究では非常に重要な手法であるが、X線 CT などの手法は大がかりで高価であり、マウスを使った小規模実験に用いるのには好ましくない。そこで、生体透過性の高い近赤外光を使ったイメージングが使われている。生体親和性の高い分散剤で CNT を分散し、それをマウスの血管に注射し、励起光を照射すると、CNT からの蛍光が近赤外カメラで鮮明に観測される。発光強度が強いため、十分なフォトンが放出され、リアルタイム観察が容易に可能となる。CNT は毒性が低いことが知られており、このマーカーを注射してもマウスは特に苦しむ様子もなく、長期にわたって観察可能である。また、癌組織の血管には 100nm 程度の穴が開いており、そこからナノ材料が漏れ出てがん組織に滞留する。これを利用すると、マウスのがん組織を明瞭に映し出すことが可能となる。抗がん剤を投与してこの様子がどのように変化するか、もしくは滞留している CNT に強力な光を照射して、直接がん組織を攻撃するなど、いろいろな応用が期待される。解剖した組織を顕微鏡で観察する際も、蛍光顕微鏡を用いれば、その組織をミクロレベルで観察可能である。この分野の研究は、今後大きく発展すると期待された。そのほか、書ききれないほど盛りだくさんの話題提供で、蔵王の研究会は幕を閉じた。

### 3. 2 CNT25

冒頭に書いた通り、2016 年 11 月 15 日～11 月 18 日の日程で、CNT 発見 25 周年を記念した国際シンポジウム CNT25 が開催された。発起人は、ナノカーボン研究会員である、東工大の斎藤晋先生である。詳しい報告が斎藤先生から別途あるとお聞きしているのですが、ここでは簡単に紹介するにとどめる。これまでも CNT 発見を記念する国際会議は行われてきたが、今回は NEDO の CNT 実用化プロジェクトの最終年度に当たることもあり、日本発の新材料の実用化を世界に発信するため、盛大な会議が開催された。初日の 11 月 15 日には霞が関のイイノホールで同時通訳付きで行われ、16-18 日は、東工大隣接の蔵前ホールで行われた。CNT 研究の大御所が世界中から集結し、大変活発な議論が展開された。

### 3. 3 第二回ナノカーボン研究会@野地温泉

テーマ：「ナノカーボン（二次元系）デバイスを考える」

蔵王の会議は、若手中心の活発で大忙しの会議であったが、冬は一転、福島の新潟温泉で会員が集って深い議論を交わした。この会議でも、東北大の斎藤先生には多大なるバックアップをしていただいた。しかし、今回の会議はいろいろとハプニング続きであった。まあ、ハプニングも無事に終われば楽しい思い出である。問題は寒波であった。

研究会前日、東北は大雪で、仙台―福島間の高速道路が通行止めになってしまった。その関係で、仙台からの参加者の足に問題が生じた。伊達理事長は、急きょ移動手段を変更し対応されたが、齋藤先生は研究会に持ってくる荷物があつたため、自家用車で温泉に向かい、大変な目にあつたようである。途中連絡もつかず、なかなか到着しない齋藤先生を心配しながら、それでもスケジュール通り研究会を開始させていただいた。もう一つのハプニングが、テーマである。CNT25 で CNT の応用展開がフォーカスされたこともあり、この研究会では委員の先生方に応用について考えていただくという提案をしたつもりであった。しかし、委員の先生方の中には二次元系材料の研究をされている方もいるので、ナノカーボンもしくは二次元系のデバイスを考えるという意味で上記タイトルを付けたのだが、これを読んだ方々は二次元系のナノカーボンデバイスを考えるととらえたようで、このテーマは難しいと、お叱りを受けた。たしかにその通りである。しかし、委員の方々は非常にまじめで、何とかこのテーマに合わせた話題をとという事で、工夫していただいた。そうして出てきた話題が、非常に興味深いものであつた。私の不手際から、意図せずに面白い話題提供となつたわけだ。もちろん、多大なご迷惑をおかけしたので、今後はこのようなことは無いように気を付けたい。



研究会風景（講演は京都大学の宮内先生）

さて、研究会の内容だが、実は CNT25 の会議中、京都大学の宮内先生から CD スペクトルのピークの同定について、私の理解が正しくないとの指摘を受けた。何やら複雑なことをおっしゃるので、それではナノカーボン研究会で話していただけませんかとお誘いしたところご快諾いただいた。そのようなわけで、トップバッターは宮内先生とな

った。複雑なので要約すると、CNTの光学吸収はすべて励起子吸収であり、CNT軸に平行な偏光の励起子と軸に直行する偏光の励起子は結合エネルギーが違うというわけである。おそらく正しいのだろう。これを考慮すると、我々のCDの解析は正しくないことになる。実は、私も全面的に正しいと思っているわけではない。CDの結果だけでは、そこまで深い解析ができないのだ。重要なことは、我々がCNTのCDスペクトルからバンド構造を導出したことにより、新たな議論が誘導されたという事だ。これだから、研究は面白い。今後何年かかけて、さらに深い理解に到達することを期待する。物性の深い理解無しに、その応用も無いからである。首都大学東京の宮田先生からは、かなり盛りだくさんの話題提供をいただいた。どれもまだ学会発表できないような内容で、非常に興味深かったが、ここで内容に踏み込むのはご迷惑がかかりそうなので、やめておく。こういった、通常の会議では聞けないような話が飛び出すところも、この研究会の良いところである。富士通の大淵先生からは、タイトル通りの内容の発表をいただき、東工大の斎藤晋先生には、壮大なテーマのご発表をいただいた。東大の長汐先生はまさにデバイスの専門家であるが、少し異なった視点から転写に関する話題提供があった。そして、へとへとになって到着した東北大の齋藤先生からは、カイラルフォノンという、難解な話題提供をいただいた。齋藤先生はもう少し螺旋を楽しむようである。

#### 4. 訃報

2017年2月20日、突然の訃報が舞い込んで来た。ナノカーボン研究に多大なる貢献をされたMITのMildred S. Dresselhaus先生が亡くなられた。ちょうど一年前の2月19日にATI会議室でナノカーボン研究会にご参加いただいた時には非常にお元気だったので、まさかという思いであった。ナノカーボン研究会の歴代委員長である遠藤先生、齋藤先生と長年にわたり共同研究をされていたので、ナノカーボン研究会としても衝撃は非常に大きなものであった。ご冥福をお祈りする。

## 研究会開催記録

【第1回】2016年7月19日(火)–20日(水) 蔵王

19 July, 2016

*Chair R. Kitaura (Nagoya Univ.)*

1. Hiromichi Kataura Excitonic band structure analysis of single chirality enantiomer SWCNT
2. Riichiro Saito Comparison of circular dichroism of molecules and nanotubes
3. Yutaka Ohno Flexible/stretchable electronics based on carbon nanotube thin film

*Chair R. Saito (Tohoku Univ.)*

4. Ryo Kitaura Bottom-up fabrication and optical properties of high-quality two-dimensional atomic layers
5. Yasumitsu Miyata Raman study of the interface of graphene and boron nitride lateral heterostructures
6. Masako Yudasaka Mouse body imaging with NIR photoluminescence of CNTs

*Chair Y. Yomogida (Tokyo Metropolitan Univ.)*

7. Jun Hirotsu Characteristic variation of carbon nanotube thin-film transistors
8. Ryo Omachi Oxidative Degradation of Carbon Nanotubes
9. An Hua Selective synthesis of single-walled carbon nanotubes from sputtered bimetallic catalyst
10. Yuki Tatsumi Laser energy dependence of the valley polarization for the optical transition in transition metal dichalcogenides
11. Yu Kobayashi Growth and characterization of MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub> lateral heterostructures

*Chair Y. Miyata (Tokyo Metropolitan Univ.)*

12. Yohei Yomogida Ambipolar transistors based on random networks of WS<sub>2</sub> nanotubes
13. Guowei Wang Development of new polymeric gels for the separation of Single-Wall Carbon Nanotubes
14. Kazu Ghalamkari Tight-binding model of TMDs
15. Takeshi Shirosaki Conventional formula of circular dichroism
16. Nguyen Tuang Hung Thermoelectricity of low-dimensional semiconductors
17. Haihao Liu Deep learning method on optical properties of atomic layers

20 July, 2016

*Chair H. Kataura (AIST)*

18. Susumu Saito Doping and interlayer interaction in h-BN sheets and nanotubes
19. Mari Ohfuchi Optical Properties of Oxidized (6,5) Carbon Nanotubes
20. Shigeo Maruyama Roles of bimetallic catalysts for controlled CVD growth of single-walled carbon nanotubes
21. Wataru Izumida Discrete energy levels in finite-length carbon nanotubes
22. A. R. T. Nugraha Selective coherent phonon generation in single wall carbon nanotubes

- |                                     |                    |   |
|-------------------------------------|--------------------|---|
| 23.                                 | Huaihong Guo       | Spontaneous antiferromagnetic order and strain-effect in alpha-graphyne atomic layer                |
| <i>Chair Y. Ohno (Nagoya Univ.)</i> |                    |   |
| 24.                                 | Eddwi Hesky Hasdeo | Quantum interference and Kohn anomaly effects in Raman spectroscopy of graphene                     |
| 25.                                 | Keigo Ohtsuka      | Voltage-triggered selective burning of metallic single-walled carbon nanotubes in full length       |
| 26.                                 | Teng Yang          | Interpreting core-level spectra of oxidizing phosphorene  |
| 27.                                 | Tomoaki Kaneko     | First-principles analysis on graphene transport adsorbed on h-BN with defects                       |
| 28.                                 | Toru Kanazawa      | Hf-based transition metal dichalcogenides for low-power logic applications                          |
| 29.                                 | Joseph Chan        | A tight-binding molecular dynamics study of formation of fullerenes                                 |
| 30.                                 | Ryosuke Akashi     | General relation between interference of the Bloch phase and stacking geometry in layered materials |
| 31.                                 | Xiaojun Wei        | Determination of Enantiomeric Purity of Single-Wall Carbon Nanotubes using Flavin Mononucleotide    |

【第2回】2017年1月16日(月)–17日(火)福島

テーマ:「ナノカーボン(二次元系)デバイスを考える」

1. 「単層カーボンナノチューブの励起子光物性とその応用」  
宮内 雄平(京都大学)
2. 「円偏光で励起するカイラルフォノンとは何か？」  
齋藤 理一郎(東北大学)
3. 「2次元層状ヘテロ構造作製のための転写プロセス」  
長汐 晃輔(東京大学)
4. 「ドーピングにより90度回転するナノチューブ偏光子の透過光軸」  
佐々木 健一(NTT 物性科学基礎研究所)
5. 「デバイス素材としての h-BN 膜およびグラフェン・h-BN 複合膜の可能性」  
齋藤 晋(東京工業大学)
6. 「グラフェンのコンタクト特性」  
大淵 真理((株)富士通研究所)
7. 「カイラリティ選択 SWNT 合成触媒金属の TEM 観察」  
丸山 茂夫(東京大学)
8. 「ペロブスカイト太陽電池におけるコストおよび安定性の  
問題解決へ向けたオールカーボンアプローチ」  
Il Jeon(東京大学)
9. 「カルコゲナイド原子層への不純物ドーピング」  
宮田 耕充(首都大学東京)
10. 「SWCNT の近赤外発光によるマウス体内造影」  
湯田坂 雅子(産総研)
11. 「半導体型 SWCNT のバンドギャップ制御」  
片浦 弘道(産総研)

## ナノカーボン研究会員名簿

片浦 弘道	産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門	首席研究員 研究会委員長
齋藤 理一郎	東北大学大学院 理学研究科物理学専攻	教授
遠藤 守信	信州大学 先鋭領域融合研究群カーボン科学研究所	特別特任教授
榎 敏明	東京工業大学	名誉教授
斎藤 晋	東京工業大学 理学院 物理学系	教授
北浦 良	名古屋大学大学院 理学研究科	准教授
湯田坂 雅子	産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門	招聘研究員
本間 芳和	東京理科大学 理学部物理学科	教授
佐々木 健一	NTT物性科学基礎研究所 量子光物性研究部	リサーチスペシャリスト
若林 克法	関西学院大学 理工学部	教授
丸山 茂夫	東京大学大学院 工学系研究科機械工学専攻	教授
大野 雄高	名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授
宮田 耕充	首都大学東京	准教授
大淵 真理	(株)富士通研究所	主管研究員
田中 丈士	産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門	主任研究員
長汐 晃輔	東京大学大学院 工学系研究科	准教授

2017年3月現在

—計算生命科学の進展—

委員長 西野 吉則  
北海道大学 教授

1. 研究構想

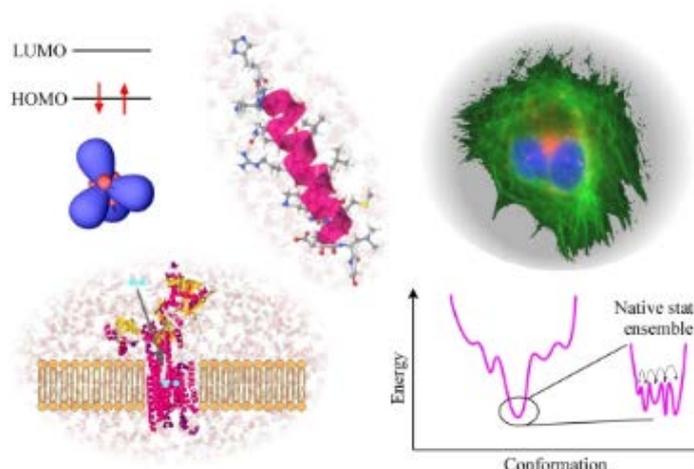
バイオ単分子研究会は、ATI研究会第6期の2009年度に発足した研究会である。第6期（2009～2011年度）および第7期（2012～2014年度）では、佐々木裕次教授（東京大学大学院新領域創成科学研究科）が委員長を務めた。第8期（2015～2017年度）では、西野が委員長を務めている。第8期におけるバイオ単分子研究会を始めるにあたり、以下の研究構想を描いた。

生命現象を動的な分子レベルから理解することは、生物学の究極の目標の一つである。これは量子力学的な「デジタル」世界と古典統計力学的な「アナログ」世界とを結び付けるといふ、自然科学の壮大な問いにも通じる。特定の立体構造をもったタンパク質分子やその複合体は、あるものは精密な「デジタル」な分子機械として振る舞う一方で、あるものは熱的なゆらぎを受けて「アナログ」な動的機能を発現する。DNAを介して「デジタル」な遺伝情報は次世代に正確に受け継がれるが、エピジェネティックな制御により「アナログ」で多様な表現型に道が開かれる。さらに、生物は雄大な時間スケールで大進化を起こす。このように、生物は、確実な動作や情報伝達を行うデジタルな世界と、多様性と個性をもったアナログな世界を巧みに使い分けて自らを制御している。

多数の分子のアンサンブル（集団）平均や時間平均ではなく、生物試料を、生きた細胞の中や生きているに近い環境

で、分子レベルで理解するには、多岐に亘る革新的な技術開発が求められる。

本研究会では、様々なプローブを用いた単分子レベルでの計測技術や、細胞の動的制御技術、さらには情報科学や理論など、様々なアプローチから、生命現象の動的な分子レベルからの理解を目指す議論を交わすことを目的とする。



(図1) ATI研究会第8期でのバイオ単分子研究会の構想図

## 2. 2016年度の研究会活動の概要

2016年度は、下記に詳述するように、バイオ単分子研究会単独での研究会を1回、水和ナノ構造研究会との合同研究会を1回開催した。さらに、ATI国際フォーラムとして開催した The 17th RIES-Hokudai international symposium on “柔”において、ATI特別セッションとして Single Biomolecules セッションを設けた。

### 2.1 2016年度第1回バイオ単分子研究会（2016年10月22～23日 兵庫県）

2016年度第1回バイオ単分子研究会は、2015年度の研究会のナイトセッションで、研究会のテーマとして今後扱いたいとの要望のあった「計算生命科学」をテーマとして、城地保昌委員に座長をお願いして企画を進めた。研究会の副題として、城地委員にいくつかご提案いただいた中から、「計算科学の守備範囲の現状とこれから」を選んだ。この副題は、ご講演者に、専門の研究会等で普段行われている講演内容に加えて、一捻り考えた発表をしていただく期待を込めたものである。

研究会の招待講演者に関して、2015年度の研究会のナイトセッションで名前の挙がった候補者に加えて、会員から新たに推薦を募り、講演の打診を行った。その結果、城地研究会員に加え、奥野恭史先生（京都大学）、水口賢司先生（医薬基盤・健康・栄養研究所）、望月敦史先生（理化学研究所）にご講演いただいた。

ATI研究会第8期のバイオ単分子研究会では、第6～7期の研究会を踏襲して、1日目は温泉地等での合宿形式での密な議論を行い、2日目は見学・視察などを行っている。見学先として、2015年度の研究会のナイトセッションでも委員から要望のあった、X線自由電子レーザー（X-ray Free-Electron Laser: XFEL）施設 SACLA を選んだ。SACLAは、座長の城地委員の勤務先でもあり、委員長の前野の以前の勤務先でもある。

研究会の開催場所としては、SACLAの最寄り駅であり、新幹線も発着する相生駅から送迎がある宿であるHOTEL 万葉岬を選んだ。瀬戸内海を一望できる金ヶ崎に位置した風光明媚な宿である。金ヶ崎は、万葉の詩人、山部赤人が「繩の浦ゆ背向に見ゆる奥つ島漕ぎ廻る舟は釣しすらしも」などの詩を詠んだことでも知られており、宿の名称でもある万葉岬とも呼ばれている。

#### 2.1.1 計算生命科学に関する研究会

1人目の発表は、城地委員が行った。まず、計算生命科学の歴史や概要に関してレビューを行った。計算生命科学の領域は幅広く、分子シミュレーション、バイオインフォマティクス、数理生物学などが含まれる。このうち、力場に基づき分子システムの挙動(機能)を計算機上で解く、分子シミュレーションによる生体分子研究は1960年代後半から研究が始まった。黎明期の研究に貢献した Martin Karplus（ハーバード大学）、Michael Levitt（スタンフォード大学）、Arieh Warshel（南カリフォルニア大学）の3名

は、2013年にノーベル化学賞を受賞した（受賞理由「複雑な化学系のためのマルチスケールモデルの開発」）。分子の動きを計算により明らかにする分子動力学（Molecular Dynamics: MD）法は、1997年にタンパク質に初めて適用された（J. A. McCammon, B. R. Gelin, M. Karplus: Nature 267, 585 (1977)）。コンピュータの進歩と共に、より原子数の多い複雑な系や、より長い時間スケールでのMDシミュレーションが行えるようになった。近年では、D. E. Shaw Researchによって開発されたタンパク質など生体高分子のMDシミュレーションに特化した超並列スーパーコンピュータであるAntonが、その圧倒的な性能で、注目を集めている。

城地研究会員のご自身の研究として、生体高分子に対するX線回折、中性子散乱、NMR、電子顕微鏡などの実験データからは直接得ることが困難な、機能と関わる生体物質の動的情報に、分子シミュレーションや数値モデルシミュレーションを援用することでアプローチした具体例が示された。解空間を限定する試みとして、X線結晶回折で得られる構造因子の温度依存性からタンパク質ダイナミクスに重要な座標系を選択する研究や、XFELを用いたコヒーレント回折イメージングにおいてモデルシミュレーションにより実験データの不完全性を補う研究が示された。また、計算機による思考実験として、極端な条件での分子シミュレーションから中性子散乱やX線小角散乱の実験データの解釈に結びつける研究が示された。さらに、SACLA測定装置の将来的な性能向上により可能となる測定を提案する数値シミュレーションが示された。

2人目は、奥野先生が「ポスト京が拓く創薬計算の未来」という演題で講演された。スーパーコンピュータ「京」の後継機となるポスト「京」（フラッグシップ2020プロジェクト）の計画が、2020年頃の本格稼働を目指して進められている。文部科学省は、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題として、9つの課題を選定して、アプリケーション開発・研究開発を進めている。奥野先生は、その9つの課題の



(写真1) 研究会での集合写真  
(2016年10月22日、HOTEL 万葉岬)

1つである「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」を課題責任者として進めている。高騰し続ける新薬の開発費の問題を、(1) ビッグデータ創薬と(2) シミュレーション創薬により克服することを提唱されている。(1) ビッグデータ創薬では、既知相互作用情報を機械学習することにより、未知のタンパク質—リガンドペアの相互作用を予測する CGBVS (Chemical Genomics-Based Virtual Screening)法が紹介された。(2) シミュレーション創薬では、MP-CAREE (Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy) 法によるタンパク質と化合物との結合親和性予測が紹介された。従来のドッキングシミュレーションでは困難であった、分子の動きや溶媒 (水分子) も含めた長時間シミュレーションを行うことにより、結合親和性の予測精度を従来の 5% から 70%に向上させる目標が示された。

3人目は、水口先生が「計算システム生物学による創薬：分子、構造からネットワークへ」という演題で講演された。*In silico* 創薬における基盤技術として、(1) データ統合とデータベース構築、(2) 大量のデータから機械学習などを用いて予測モデルを構築する統計モデリング、(3) 第一原理に基づく数理モデリング、の3つが挙げられた。(1) データベースに関して、水口先生が開発された TargetMine という創薬ターゲットの絞り込みを支援する統合データウェアハウスが紹介された。TargetMine には、タンパク質、遺伝子、相互作用、医薬品、疾患などに関する国際的に広く使用されている主要な公共データベースからのデータが統合されており、既存の公共ツールでは困難な、タンパク質立体構造や医薬品関係データ、転写因子とその作用遺伝子の関係等の情報の統合的検索が可能になっている。また、TargetMine を用いた C 型肝炎新規ターゲット候補の同定の例などが紹介された。(2) 統計モデリングに関しては、リガンドベースと構造ベースのスクリーニング法を組み合わせた独自のスクリーニング法などが紹介された。(3) データ駆動型のモデリングを補う形での第一原理に基づく数理モデリングに関しては、体内薬物動態の予測や MD シミュレーションが紹介された。

4人目は、望月先生が、「生命システムの振る舞いをネットワークの形だけから予測する」という演題で講演された。極めて斬新で、幅広いネットワークに適用可能な汎用性の高い研究であった。望月先生らは、化学反応ネットワークの構造だけから、酵素の量や活性が変化したときのシステムの応答を予測する数理理論 (Structural sensitivity analysis) を構築した。その結果、(1) 酵素の変化に対する化学反応系の定性的応答 (増加 or 減少 or 変化なし) が、ネットワークの形だけから決められること、また、(2-1) 酵素の変動に対する応答の範囲は、ネットワーク上の限られた部分にとどまること、(2-2) 化学反応系の様々な場所に摂動を与えた時、応答の範囲は階層的な入れ子パターンを示すことを発見した。そして、(3) これらの特徴的パターンを全て説明する、一般的な原理「限局則」を証明した。ネットワークの任意の部分構造に含まれる、分子種の数、反応の数、ループ構造の数が、ある簡単な算術条件を満たしているとき、その部分は「緩衝構造」となり、構造内の反応に与えられた変動の影響は、内部のみにとどまり、外部

の濃度や反応には全く影響を与えないことが示された。酵素の摂動をその内側で吸収して外に伝えない「緩衝構造」は、生命システムに恒常性や頑健性を与える構造として、進化してきた可能性が示唆された。

ナイトセッションでは、近年進展がめざましい、人工知能などについて議論が交わされた。

## 2.1.2 X線自由電子レーザー (X-ray Free-Electron Laser: XFEL) 施設 SACLA の見学

XFEL は、現在、日本とアメリカでのみユーザー利用が可能な最先端の X 線である。従来の放射光と比べて 10 億倍という桁違いに強いピーク輝度、フェムト秒オーダーの極めて短いパルス幅、ほぼ完全な空間コヒーレンスを有しているのが特長である。日本の SACLA は、2011 年にレーザー発振に成功し、2012 年よりユーザー運転を行っている。日本とアメリカに追いつくべく、ヨーロッパ (European XFEL)、スイス (SwissFEL)、韓国 (PAL-FEL) において、ユーザー運転に向けた調整運転が進められている。

城地研究会員から SACLA のビームラインにおいて、シリアルフェムト秒 X 線結晶構造解析 (Serial Femtosecond Crystallography: SFX) やコヒーレント回折イメージング (Coherent Diffractive Imaging: CDI) の原理や装置について説明があった。その後、同じ SACLA 利用実験棟に設置されたストレージシステムや HPC (high-performance computing) システムの見学があった。これらは、SFX 実験や CDI 実験に用いられる、SACLA で開発された 2 次元検出器 MPCCD (Multi-Port Charge-Coupled Device) のデータを、4 Gbps の高スループットで保存し、即時データ解析することに用いられている。なお、今回の見学には含まれなかったが、SPring-8 サイト内には、「京」と同じアーキテクチャーの並列コンピュータシステム FX10 (ミニ京) もあり、SACLA のデータ解析



(写真 2) X線自由電子レーザー施設 SACLA 見学での集合写真  
(2016 年 10 月 23 日, SACLA)

に利用されている。

## 2.2 2016年度水和ナノ構造・バイオ単分子合同研究会（2017年3月27日ソラシティ）

大島泰郎研究会員の提案で、水和ナノ構造研究会とバイオ単分子研究会との合同研究会が開催された。合同研究会のテーマは「タンパク質ダイナミクスへの多角的アプローチ」とした。水和ナノ構造研究会とバイオ単分子研究会からそれぞれ2名が講演を行った。バイオ単分子研究会からは、佐藤衛先生（横浜市立大学）と関口博史研究会員が講演を行った。

佐藤先生は、「X線溶液散乱と分子動力学計算でみるタンパク質の動的構造と水和構造」という演題で講演された。特定の立体構造をとらない天然変性タンパク質（Intrinsically Disordered Protein: IDP）は、真核生物では極めて多く、ヒトでは4割近いタンパク質がIDPである。X線溶液散乱（タンパク質溶液試料に対するX線小角散乱（Small-Angle X-ray Scattering: SAXS））では、任意の溶媒条件下におけるタンパク質の低分解能での構造モデルが構築できるが、構造情報は時間平均されるため、IDPに対しては揺らぎの情報が消失するという問題があった。この問題を解決する方法として佐藤先生が推し進めるMD-SAXS法が紹介された。またMD-SAXS法のクロマチンの動的構造などへの応用例が示された。

関口研究会員は、「放射光X線と結晶プローブを用いた水溶液中・局所ダイナミクス計測」という演題で講演された。佐々木裕次研究会員が開発したX線1分子計測（Diffracted X-ray Tracking: DXT）の概要および、佐々木研究会員や養王田研究会員との共同研究で行った変性したタンパク質分子を修復する機能を持つシャペロニンタンパク質分子の内部運動の1分子リアルタイム計測の応用例などが示された。研究により、8量体のリング構造が二つ重なったシリンダ構造をとるシャペロニンにATPが結合すると、リング内の一部が構造変化し、その後リング全体で同期したドミノ倒しに似たねじれ運動を伴って開状態から閉状態へ移行することが示された。



(写真3) 合同研究会での佐藤先生の講演  
(2017年3月27日, ソラシティ)



(写真4) RIES-Hokudai International  
Symposium on 柔のATI 特別セッション  
(左) 古田会員, (右) 飯野会員  
(2016年12月14日,  
シャトレーゼ ガトーキングダム サッポロ)

### 2.3 The 17th RIES-Hokudai International Symposium on “柔” (2016年12月13～14日 シャトレーゼ ガトーキングダム サッポロ)

ATI 国際フォーラムとして The 17th RIES-Hokudai international symposium on “柔”を開催した。この会議において、ATI 特別セッションとして Single Biomolecules セッションを設け、古田寿昭研究会員、飯野亮太研究会員にご講演頂いた。なお、この ATI 国際フォーラムの概要は、ATI News 第 22 号で報告した。

古田会員は、「Caged Compounds as Optochemical Genetic Tools—Design, Synthesis and Their Use」という演題で講演された。古田会員が開発した、Bhc 基 (6-Bromo-7-hydroxycoumarin-4-ylmethyl 基) を光分解性保護基 (ケージ) としてもつ、ケージド化合物などについてお話された。Bhc 基は、紫外光によるケージ解除の効率が高い、暗所での安定性が高い、2 光子励起を利用することで近赤外光によるケージ解除が可能である、簡単な修飾を施すことで様々な方法で細胞内に導入することができる、などの特長をもつ。また、ご自身も参加されている科研費・新学術領域研究・学術研究支援基盤形成「先端バイオイメーjing 支援プラットフォーム(Advanced Bio-imaging Support: ABiS)」についても紹介された。

飯野会員は、「Watching Dynamic Motions of Biological Molecular Machines」という演題で講演された。金属ナノプローブなどを用いた、分子モーターの運動と構造変化の高速 1 分子計測についてお話された。ATP の加水分解をエネルギー源として用いる、F<sub>1</sub>-ATPase などの回転モーターや、キネシンやミオシンなどのリニアモーターに加えて、レールである多糖の加水分解をエネルギー源として用いるセルラーゼやキナーゼなどのリニアモーターの観察例が報告された。また、分子モーターの観察のみならず、V<sub>1</sub>-ATPase の回転速度を制御するなど、天然に存在しない新しい生体分子機械を積極的に創ることで作動原理をボトムアップで理解する試みにも触れられた。

### 3. 研究成果とトピックスなど

秋山修志研究会員が「藍藻生物時計システムの発振周期を定める構造基盤と階層性の解明」に関する業績で、平成 28 年度日本学術振興会賞を受賞した。外部資金では、小松崎民樹研究会員が「細胞ラマン計測と情報科学の融合による細胞診断の迅速解析技術の開発」という課題で、CREST (「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント、計測・解析手法の開発と応用 (情報計測)」領域) に採択された。

## 研究会開催記録

【第1回】2016年10月22日（土）－23日（日）相生、SACLA

テーマ：「計算生命科学 - 計算科学の守備範囲の現状とこれから - 」

10月22日（土）

1. 「計算機実験を援用する実験データ解析」  
城地 保昌（高輝度光科学研究センター）
2. 「ポスト京が拓く創薬計算の未来」  
奥野 恭史（京都大学）
3. 「計算システム生物学による創薬：分子、構造からネットワークへ」  
水口 賢司（医薬基盤・健康・栄養研究所）
4. 「生命システムの振る舞いをネットワークの形だけから予測する」  
望月 敦史（理研）

10月23日（日）

X線自由電子レーザー施設 SACLA 見学

【第2回】2017年3月27日（月）御茶ノ水

水和ナノ構造研究会との合同研究会

テーマ：「タンパク質ダイナミクスへの多角的アプローチ」

1. 「トリプレット DNP ～高温・低磁場での核偏極生成と  
タンパク質研究における展望～」  
上坂 友洋（理研仁科加速器研究センター）
2. 「金属タンパク質の構造変化：活性部位の構造変化とタンパク質の超分子構造体形成」  
廣田 俊（奈良先端科学技術大学）
3. 「X線溶液散乱と分子動力学計算でみるタンパク質の動的構造と水和構造」  
佐藤 衛（横浜市立大学）
4. 「放射光 X線と結晶プローブを用いた水溶液中・局所ダイナミクス計測」  
関口 博史（高輝度光科学研究センター）

## バイオ単分子研究会員名簿

西野 吉則	北海道大学 電子科学研究所	教授 研究会委員長
佐々木 裕次	東京大学大学院 新領域創成科学研究科	教授
井出 徹	岡山大学 自然科学研究科	教授
大島 泰郎	共和化工(株) 環境微生物学研究所	所長
飯野 亮太	岡崎統合バイオサイエンスセンター	教授
関口 博史	高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門	チームリーダー
宮澤 淳夫	兵庫県立大学大学院 生命理学研究科	教授
小松崎 民樹	北海道大学 電子科学研究所附属社会創造数学研究センター	センター長・教授
平野 美奈子	光産業創成大学院大学 光バイオ分野	講師
朽尾 豪人	京都大学大学院 理学研究科	教授
城地 保昌	高輝度光科学研究センター	チームリーダー
須藤 雄気	岡山大学大学院 医歯薬学総合研究科	教授
秋山 修志	分子化学研究所 協奏分子システム研究センター	センター長
古田 寿昭	東邦大学 理学部	教授
養玉田 正文	東京農工大学大学院 工学府	教授

2017年3月現在

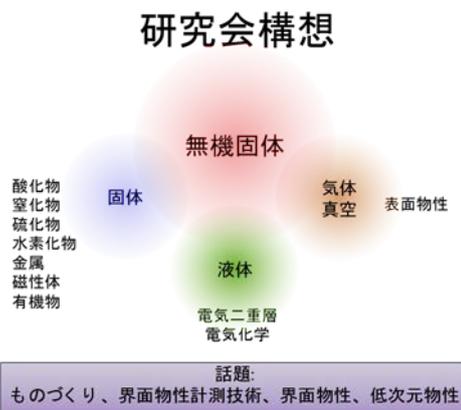
## 界面ナノ科学を取り巻く環境

委員長 一杉 太郎  
東京工業大学 教授

### 1. 研究構想

界面ナノ科学研究会では幅広い分野の研究者を集め、無機固体物質を中心とした界面物性に関する学理の構築に力を注いでいる(図 1)。その研究テーマは界面が関わる電気伝導性、磁性、誘電性、化学反応と多岐にわたり、最新の物性制御法、試料作製法、評価法、物性発現の理論までカバーする。

本研究会は 2015 年度から第二期に入り、今年度が 2 年目である。人材交流を重視しつつ、多彩な界面について研究を進めている。



(図 1) 無機固体を軸として、他の物質系と形成する界面機能を研究対象とする。

### 2. 界面ナノ科学研究を取り巻く環境

日本の研究力低下が Nature 誌で取りあげられ、議論が巻き起こったことは記憶に新しい。昨今、日本発の論文数が低下していることは明白である<sup>1</sup>。特に固体物理分野の論文数は顕著であり、2015 年は 2003 年の半数以下になっている(その分析については参考文献をご覧ください<sup>2</sup>)。

そこで、実験手法ごとに、「それを活用した研究数」の推移について考えてみたい。特に、ATI と関わりが深い、走査トンネル顕微鏡(STM)や原子間力顕微鏡(AFM)から検討し、さらに、光電子分光や走査透過電子顕微鏡(STEM)と比較して考察していく。

#### 取り巻く環境

STM は誕生からすでに 36 年が経過した。今でも Nature や Science 誌等に STM を用いた研究が多く掲載されており、ホットな実験装置である。STM は物質研究のツールとして活用され、高温超伝導体、トポロジカル絶縁体、グラフェンなどへ幅広く適用されている。

<sup>1</sup> N. Phillips: Nature 543, S7 (2017).

<sup>2</sup> 桑原真人、日本物理学会誌 72, 246 (2017).

一般に、技術は発展期、最盛期(安定期)、衰退期を必ず迎えるものである<sup>3</sup>。では、現在のSTMは、これらのどの時期に該当するのだろうか。私自身の直感では、STMが最大の輝きを放っていたのは1990年代ではなかろうか。Eiglerらが原子を動かし、Hoらが化学結合を操るなど、ナノテクノロジーという文脈で<sup>4,5</sup>脚光を浴びた。したがって、発展期は過ぎているだろう。

これを裏付ける結果が、データベース(Web of Science)を用いた分析によって得られた。STMを活用した研究について、「毎年の文献数」を調べると、非常に興味深いことが分かってくる。タイトルとアブストラクトに”scanning tunnel\* microscop\*”を含む、論文、総説、プロシーディングス等の総数を図2に示す。この結果を見ると、1981年の発明後、急速に論文数が増え、1998年に2,000報を越えている(2,017報)。しかし、そこで急速にブレーキがかかり、漸減して2016年には1,754報であった。減少は緩やかであり、世界的には「安定期」であるといつて良いだろう。これらのデータは、前述の、「1990年代が華である」という直感を支持する結果になっている。

では、日本に注目してみよう。上記の結果から、著者所属に“Japan”を含むものを絞り込んだ。この場合、日本の研究機関に所属する研究者が、著者の中に1名でも入っていればカウントされる。驚くべきことに、1999年をピークとして(461報)、現在ではピーク時の半分弱の論文数となっている(2016年に209報)。中国と比較してみると、勢いの差は歴然である。この激減の理由は何だろうか？

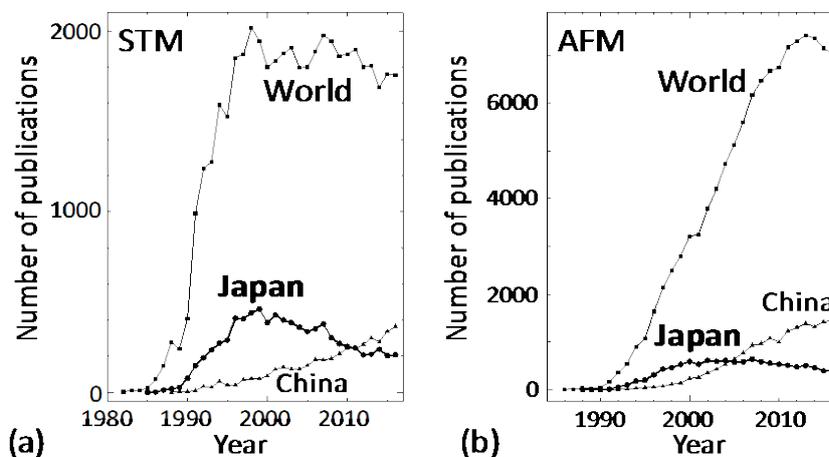


図2 (a) 走査トンネル顕微鏡(STM)に関連した論文、レビュー、プロシーディングスの総数。全世界、日本、中国発の文献について、毎年の推移を調べた。

(b) 同様に、原子間力顕微鏡(AFM)について調べた結果。

Web of Science より、本文に記載した条件で検索した。

<sup>3</sup> C. クリステンセン：“イノベーションのジレンマ—技術革新が巨大企業を滅ぼすとき” (翔泳社 2001).

<sup>4</sup> 科学技術振興機構 研究開発戦略センター(CRDS)、研究開発の俯瞰報告書 ナノテク・材料分野 (2017).

<sup>5</sup> D. M. ベルーベ：“ナノハイブナノ・ハイブ狂騒 アメリカのナノテク戦略” (みすず書房、2009).

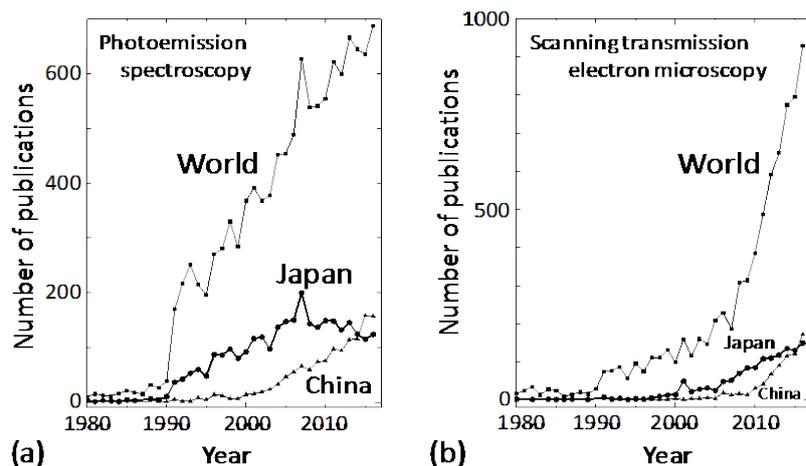


図 3 (a) 光電子分光に関連した論文、レビュー、プロシーディングスの総数。全世界、日本、中国発の文献について、毎年の推移を調べた。  
 (b) 同様に、走査透過電子顕微鏡(STEM)について調べた結果。  
 Web of Science より、本文に記載した条件で検索した。

さらに、原子間力顕微鏡(AFM)について、“atomic force microscop\*”として検索した (図 2(b))。全世界では、AFM を活用した研究数は順調に伸び、2011 年以降は毎年 7,000 報を越えている。しかし、日本では、漸減しているのが実情である。

このような調査を光電子分光(“photoemission spectroscopy”として検索)と STEM(“scanning transmission electron microscop\*”として検索)でも行った(図 3)。光電子分光においても、2007 年をピークとして、漸減しているように見える。これは私には予想外であった。光電子分光はますますプレイヤーが増えている印象が強かったからである。一方、STEM は論文数が伸びており、共用装置、あるいは、分析会社における依頼測定が広がっていることから推察できる。ただし、STEM でさえ、学界においてはこの先いつまで伸び続けるのかは定かではなく、いずれ減少に転じるのは確実である。

ここで紙面が許す限り考察を進めたい。このグラフを見ていると以下の四つのことに気がつく。

1. 日本では STM 関連の論文数がピークの半分以下になっているのはなぜか?
2. 全世界の統計では、STM は伸びが急に止まり、安定期に入った。この急ブレーキの原因は何か?
3. STM が 1999 年に論文数がピークを迎えるのに対し、AFM は 2013 年にピークを迎えている。この 14 年のギャップを生む要因は何か。
4. 日本と中国における、研究の立ち上がりの年について差が縮まっている。

#### 考察 1 日本での論文数の低下：日本における研究者のキャリアとその現状分析

論文数の減少は、研究者の数、すなわち、ポストの数とリンクしているはずである。そこで、研

研究者のキャリアに着目しよう。1980年代にSTMの基礎固めがなされ、1990年代にSTMを表面科学研究に活用する数多くの若手研究者が活躍し、その方々が1990年代、2000年代初頭に教授となって研究室を主宰するに至った。そして、昨今、定年を迎えはじめ、研究の現場から離れつつある(1990年に38歳であれば、2017年に65歳)。

今考えるべきことは、定年を迎えた先生方の後のポストである。つまり、表面科学やSTMの専門家が後を継いでいるか?という点である。

これについてはあいにく統計的な情報を持ち合わせていない。私を知っている範囲で、最近退職された教授の後任を冷静に見てみると、答えは明らかに「否」である。つまり、STMを活用していた表面科学系の研究室の後を、そのまま表面科学系の研究室が継ぐケースは極めて少ないという印象である。したがって、表面科学の研究者は、「他分野の研究者を押しつけ」、独立を勝ち取らねばならない。その推測がある程度の射ているとした場合、その要因を考えた。

これについては、最近、日本表面科学会誌に寄稿したので、そちらを参照していただきたい。

#### **考察2: STMはなぜ伸びが急に止まり、1999年にピークを迎えたのか。**

これは非常に不思議である。米国がナノテク分野の主導権を握るべくスタートした National Nanotechnology Initiative (NNI, <https://www.nano.gov/>)は2000年の設立である。STMはナノテクの代名詞であったはずだが、実はNNIが始まる前に、ピークを迎えていたのである。

この要因の一つには、STMを用いた研究が応用に直結しないため、STMに流れ込む研究費総額が増えていないということが挙げられるであろう。つまり、企業に実験装置が入っていく余地が無いように、大学や公的な研究機関に行き渡ったため、論文数が増えなくなると推察することができる。

#### **考察3: 14年のギャップがなぜ生まれたのか。**

STMは発明から18年でピークを迎えた。一方、AFMは、27年後にピークを迎えた。この差は、AFMが「異分野にて活躍している」からこそ生じているのではなかろうか。実際に、データベースで検索すると、AFMの利用が生物学、医学、農学などにも広がっており、非常に重要な技術であることが分かる。そのため、多くの分野に広がっていくのに、9年の差が出たのかもしれない。STMの場合、研究分野の広がりが少ないため、その分、短時間で飽和したと言えるのではないだろうか。

#### **考察4: 日本と中国における、研究の立ち上がりの差**

これは非常に興味深い。STM、AFM、光電子分光では、日本と中国の立ち上がりには差がある。しかし、最近、広まってきた実験装置であるSTEMの場合、見方にもよるが、差が小さいように見える(図3(b))。

そのうち、中国が先に立ち上がり、日本が後追いする時代になるのは確実である。本稿は実験装置を主題としたが、物質開発の例として、鉄系超伝導体開発が挙げられる。日本で発見されな

がら、発見後の最高転移温度の向上は中国が主体であり、絨毯爆撃的なカチオン置換により、最高転移温度の更新は中国人研究者の独壇場であった。このような人海戦術は、現代の日本では制度・体力的に難しい。そのような時代にどのように研究を進めるのか、今から考えて実際にシフトしておく必要がある。

何よりも生産性の向上が必要である。そのための方策の一つが、マテリアルズインフォマティクスの導入により、高速にスクリーニングすることである。さらに、昨年度の本報告書で述べたように、AI と人工知能を導入した「ロボット科学者」がどうしても必要になってくる。学術・産業の国際的競争力を保持するうえで、材料研究・開発スタイルの刷新は喫緊の課題である。

### 3. 2016 年度の研究活動の概要

本研究会メンバーには、ものづくり、物性測定、第一原理計算・理論家、など多様な人材がそろっており、メンバーは総勢 15 名である。メンバー間のフランクな関係を築き上げ、「議論すべきことはきっちり議論する」、という姿勢で、研究会メンバー内で幹事を決め、研究会を開催している。

#### 第一回研究会 2016 年 7 月 4 日@越後湯沢

越後湯沢にて研究会を開催した。駅に到着後、最初に行ったことは、日本酒の試飲と購入である。越後湯沢駅には利き酒コーナーがあり、彩り華やかな日本酒のラベルを愛でつつ、様々な味わいを楽しむことができる。購入したのはもちろん、夜の交流会のためである。界面ナノ科学研究会は、人のつながりを作ることを重視しているので、そのためのツールとして日本酒は欠かせない(単に私が日本酒好きということだけが理由ではないことを強調したい)。

研究会は、東工大・教授・大場史康さんの講演から始まった。今、脚光を浴びているデータ科学を活用して新物質開拓を進めている。膨大な候補物質の中から効率的に理論予測(スクリーニング)を行い、実際に物質を合成する、「物質研究のあるべき姿」を見ることができた。その研究プロセスから現状の研究者層を考えると、「コンピュータを駆使して計算できる研究者」が不足していると感じた。

次は、新規ヒドリド伝導体の開発に成功した分子研・准教授・小林玄器さんの講演である。水素の陰イオンをヒドリド(H)と呼び、ヒドリドイオン伝導体を活用した高電位・高容量のエネルギーデバイスが期待される。小林さんらは固体電解質  $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1-x+y}\text{O}_{3-y}$  の開発に成功し、極めて高いイオン伝導性に一同驚いた。

この 2 名の講演は、各自 2 時間の持ち時間だった。

その後 ATI 研究助成採択者の講演を行った。

界面ナノ科学研究会では、採択者と研究会員の交流を進めるため、研究会に数名お呼びして、講演をいただいている。今回は3名の研究者をお呼びした。

- 東北大学・助教・丸山伸伍さん: イオン液体の薄膜作製について報告していただいた。ガスセンサーへの応用も検討され、今後の展開が楽しみである。
- 東工大・助教・北條元さん:  $\text{BiFe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{O}_3$ において、室温で強磁性と強誘電性が共存していることが示された。室温で実現していることは非常に意義深く、今後、エレクトロニクスデバイスへの応用が期待される。
- 東北大学・助教・伊野浩介さん: 集積化された電気化学デバイスによるバイオイメーキングが報告された。細胞活性が実際に評価され、イメージングシステムの再生医療や創薬研究への応用が期待される。

## 第二回研究会 2017年3月30日@お茶の水

年度末の忙しい時期にお集まりいただいた皆さんに感謝である。私の場合、予算の締めが完了できるか不安を持ちつつ研究会が始まった(秘書さん頼み)。しかし、研究会が一旦始まると、そのことはまったく忘れ去り、興味深い講演に没頭することができた。

トップバッターは分子研・教授・岡本裕巳さんである。金の微小ロッドに生じるプラズモンの空間分布について、当初は予想もできなかった実験結果について講演いただいた。走査近接場光学顕微鏡と超短パルス光技術を組み合わせて世界で唯一の実験装置を作り上げ、画期的な成果を上げておられるのが非常に印象的であった。また、研究キャリアについても強く記憶に残った。教授になってから、准教授時代の研究から大転換して新しいこと、すなわち上記テーマを始めたとのことである。自分自身もそのようにたくましく研究を続けたいと強く思った。

次に、大阪大学・准教授・酒井英明さんから、ディラック電子状態を有するビスマス正方格子層の物性に関する研究を紹介していただいた。そのディラック電子状態が、ビスマス正方格子近傍の原子のスピン状態に影響を受け、特異な物性を示すことが議論された。また、モリブデンダイカルコゲナイドについて、元素置換により極性-非極性転移の制御に成功し、強誘電金属の合成を報告した。そして、臨界点近傍における異常な熱電能の増大が報告された。

続いて、ATI 研究助成採択者からの講演である。

- 東京大学・助教・坂本良太さん: 液液界面、あるいは気液界面を舞台として分子合成する研究について延べた。今後、特徴的な電氣的・磁氣的性質が発現する新たな二次元物質の誕生を期待したい。
- 東北大学・助手・込山英秋さん: ブロック共重合体ナノ相分離構造を用いたプロセスについて講演していただいた。二種類の相に分離した構造を作製し、選択的に片方の相にのみ物質が入っていく仕組みを上手に使い、様々なナノ構造の形成を行っていた。中空の穴があいたテンプレートでは実現できない構造が多数示され、新機能の誕生を期待が望まれる。

## 研究会開催記録

【第1回】2016年7月4日（月）－5日（火）越後湯沢

1. 「先進計算科学による半導体物性の高精度予測と新物質探索」  
大場 史康（東京工業大学）
2. 「ヒドリドイオン導電体の開発」  
小林 玄器（自然科学研究機構 分子科学研究所）

研究助成採択者による講演

3. 「イオン液体ナノ薄膜の構造と物性」  
丸山 伸伍（東北大学）（2014年度）
4. 「Co置換BiFeO<sub>3</sub>薄膜における強磁性発現と強誘電・強磁性ドメインの相関」  
北條 元（東京工業大学）（2015年度）
5. 「マイクロ・ナノ電気化学に基づくバイオイメーjingデバイス」  
伊野 浩介（東北大学）（2015年度）

【第2回】2017年3月30日（木）御茶ノ水

1. 「プラズモンの近接場光学イメージング：  
光場構造，波束伝搬ダイナミクス，キラリティの実空間観察」  
岡本 裕巳（自然科学研究機構 分子科学研究所）
2. 「機能性原子層の三次元積層物質における新奇量子物性の開拓」  
酒井 英明（大阪大学）

研究助成採択者による講演

3. 「ボトムアップ型ナノシート：構築と機能」  
坂本 良太（東京大学）
4. 「ブロック共重合体ナノ相分離構造を用いたテンプレートプロセス」  
込山 英秋（東北大学）

## 界面ナノ科学研究会員名簿

一杉 太郎	東京工業大学 物質理工学院	教授 研究会委員長
山田 啓文	京都大学 工学研究科電子工学専攻	教授
梶村 皓二	産業技術総合研究所 電子光技術研究部門	研究顧問
高橋 琢二	東京大学 生産技術研究所マイクロナノメカトロニクス国際研究センター	教授
森田 清三	大阪大学	名誉教授
大友 明	東京工業大学 物質理工学院応用化学系	教授
柴田 直哉	東京大学大学院 工学系研究科総合研究機構	准教授
戸川 欣彦	大阪府立大学 工学研究科 電子数物系専攻	准教授
陰山 洋	京都大学大学院 工学研究科物質エネルギー化学専攻	教授
村上 修一	東京工業大学 理学院物理学系	教授
合田 義弘	東京工業大学 物質理工学院 材料系	准教授
安藤 康伸	産業技術総合研究所	研究員
千葉 大地	東京大学 工学系研究科物理工学専攻	准教授
福間 剛士	金沢大学 理工研究域電子情報学系	教授
杉本 宜昭	東京大学大学院 新領域創成科学研究科物質系専攻	准教授

2017年3月現在

## 第 11 回 合同研究会 開催報告 『新世代研究所 30 周年記念』

日時：2016 年 11 月 22 日 (火) 14:00－16:50

会場：TKPガーデンシティ御茶ノ水 3A 室  
(三井住友海上駿河台新館 3 階)

今年度は、テーマを「新世代研究所設立30周年記念」として、ATIの草創期の理念に立ち返って、その変遷を辿る特別企画を立てました。また、最近の科学政策、特に小型研究について日本学術振興会理事の家氏にご講演をお願いしました。さらに進展が著しいスピントロニクス現状についてご講演を前川評議員をお願いしました。

### <プログラム>

- |                                      |             |
|--------------------------------------|-------------|
| 1. 挨拶                                | 14:00－14:10 |
| 藤井 美英 (セイコーインスツル(株)代表取締役会長)          |             |
| 2. 講演「ATIの30年」                       | 14:10－14:40 |
| 伊達 宗行 (新世代研究所 理事長)                   |             |
| 3. 講演「ATI草創の頃」                       | 14:40－15:00 |
| 和田 昭允 (新世代研究所 最高顧問)                  |             |
| － 休憩 －                               |             |
| 4. 特別講演「学術振興と学術システム、その課題」            | 15:20－16:05 |
| 家 泰弘 (日本学術振興会理事、前東京大学物性研究所所長)        |             |
| 5. 特別講演「アインシュタインからスピントロニクスへ」         | 16:05－16:50 |
| 前川 禎通 (日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター センター長) |             |



## ATI 合同研究会 開催記

### 「新世代研究所 30 周年記念」

ATI 理事 梶村 皓二  
産業技術総合研究所 研究顧問

新世代研究所は、科学技術の分野において異なった発想を持つ人たちが、専門領域を超えて研究を進め、新世代を担う人材を育てることをその目的として掲げている。

2016年11月22日（火）、TKPガーデンシティ御茶ノ水（三井住友海上駿河台新館）において、新世代研究所30周年を記念する第11回ATI合同研究会が開催された。新世代研究所は1986年、セイコー電子工業の支援の下に任意団体として活動を開始して以来30年になる。今回の合同研究会では、ATIの草創期の理念に立ち返って、その変遷をたどる企画が立てられた。また、最近の学術政策と進展著しいスピントロニクスの現状について2つの特別講演が行われた。参加者は約50名であった。

藤井美英セイコーインスツル代表取締役会長は冒頭のあいさつで、経済の好不況にかかわらず、財団への経済的支援に対し企業としての具体的・直接的フィードバックを期待する面もないではないが、専門領域を超えた科学研究の推進や科学におけるブレイクスルーを担う人材の育成に貢献することも企業としての役目であると述べられた。財団とここに集うメンバーにとって誠に励みになる挨拶であった。感謝の気持ちを表す。

伊達宗行新世代研究所理事長の講演「ATIの30年」では、30年の歴史を3期に分け、任意団体としての1986-1992年の6年間、財団法人としての1993-2011年の19年間、2012-2016年の5年間が現在進行中の公益法人であることを述べられた。25周年の詳細な記録が既にあるので、『激動の時代』と言える最近の5年間に絞った話題とされた。特に公益財団法人化問題と財政問題である。第3期の始まりでは、場合によっては新世代研究所の存亡や活動の停滞につながりかねない事態に直面していた。伊達宗行理事長の強い意志と的確なかじ取り、副理事長、事務局の知恵と懸命の努力の結果、今日の公益財団法人のスムーズな運営と質の高い研究評価、研究支援など見事な成果が得られていることに敬意を表する次第である。

和田昭允新世代研究所最高顧問の講演「ATI草創の頃」では、この組織は大げさな道具立てで始まったわけではなく、ほんの数名の親しい談話会から始まったと述べられた。学習院時代からの同級生・テニス仲間だった故服部一郎元第二精工舎社長（1932-1987）と東大理学部化学教室での先輩で、1954年にハーバード大学で再会し、その後親しく付き合ってきた故原禮之助元セイコー電子工業社長・前新世代研究所理事長（1925-2015）の3人が「これまであくせく働いてきたが、そろそろ落ち着いて世の中を眺め、仕事や専門以外のいろいろな人と広く付き合い、教養を高め、ヒューマン・ネットワー

クを拡げて行こうではないか」ということになったそうである。極めてプライベートのように見えるが、希望を持って将来を見据えている、視野が広く見識の高い3人の集まりがこの新世代研究所の源流である。その理念は、招待した人の話を聴く最初の「サロン」（1972年）以来脈々と流れている。話を聴いた人たちが次々と加ってメンバーが増え、そこに内山哲夫氏というユニークな事務局長が加わり、服部一郎、原禮之助両氏の厚意によって、新御茶ノ水のビルの一画に「新世代研究所」を構え、1986年に任意団体、1993年に法人化された。尽きない話しだと思われるが簡潔に要約された。

家泰弘日本学術振興会理事の特別講演「学術振興と学術システム、その課題」では、新世代研究所のメンバーの多くが関わりの深い日本学術振興会の学術システムと研究活動の健全化に関わる取り組みが紹介された。学術システムとは、家氏の定義によれば、学術研究に関わる人的資源・組織制度・資金配分などの総体である。学術の発展にはそれらが上手く噛み合っただけでシステムとして機能しなければならないと述べられた。現在研究者が置かれている状況や学術政策のあり方は、将来に不安を抱かせるものである。運営費交付金の削減によるテニユアポストの減少、基盤的経費から競争的資金への予算移行、研究成果の社会的インパクトを性急に求める「出口志向」の風潮、人文社会学系学問の軽視など、研究現場や若手研究者のマインド・セットに深刻な影響を及ぼす懸念材料が多いことを指摘された。筆者が20年近く前、国立研究機関の運営や機構改革に関与した頃に比べ事態はより深刻になっている点で同感である。このような動向の要因は、逼迫した国の財政事情や経営に余裕の無くなっている産業界の状況にあること、大学ランキングや論文数のシェアから見て研究力の低下を指摘する声があること、また研究不正事例が科学や科学者に対する社会の信頼を毀損しているという状況もあることを指摘された。このような状況を踏まえて、詳細な分析に基づく健全化の方策について述べられた。重要な点は研究者の自覚と自律であるとの言葉で話しを締めくくられた。

前川禎通日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター長の特別講演「アインシュタインからスピントロニクスへ」では、量子力学の始まる10年も前(1915年)にアインシュタインは磁石が磁化するとき回転運動が誘起されることを見出し、磁性の起源が電子の持つ角運動量であることを証明したという話から始まった。電子は電荷と磁気の基であるスピンを持っている。今世紀に入って、前川氏の主導で、電子スピンの流れを電荷の流れに置き換えようとする研究が世界的に盛んになっている [S. Maekawa (ed.), *Concepts in Spin Electronics*, Oxford Univ. Press (2006)]。電子スピンに加えて、核スピン、物体の力学回転、表面音波や流体の局所回転運動等、物質に存在する様々な角運動量は、角運動量とエネルギー保存則により、力学運動との相互変換が可能である。アインシュタインの発見は力学運動と物質の持つ角運動量の保存則を示している。最近の前川氏グループの物理的概念と実験により、このことが明確に示された。またスピントロニクスにとどまらず、原子核物理、ナノメカトロニクス、量子スピン情報などの広い分野への展開が大いに期待されることも付け加えておられた。



発行 : 公益財団法人 新世代研究所  
Foundation Advanced Technology Institute

〒101-0063

東京都千代田区神田淡路町 1-23-5 淡路町龍名館ビル 4 階

電話 : 03-3255-5922 ファックス : 03-3255-5926

ホームページ : <http://www/ati.or.jp>