益財団法人新世代研究所

研 究 報 告 書

-2017年度研究会活動-

第25回 研究報告会

2018年7月10日



一目次一

(1)	『スピントロニクスにおけるスピン変換現象』 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)	『ナノカーボン、次の一手』 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)	19
(4)	『2017 年度バイオ単分子研究会活動報告 一機能するタンパク質を活写する―』 西野 吉則 (バイオ単分子研究会/北海道大学 教授)	29
(5)	『界面ナノ科学研究会(第8期)の総括』 一杉 太郎(界面ナノ科学研究会/東京工業大学 教授)	38

スピントロニクスにおけるスピン変換現象

委員長 大谷義近 東京大学物性研究所 教授

1. 研究構想

最近のスピントロニクス研究の中で、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台頭している。2014年から本研究会の委員が中心となって立ち上げた新学術領域研究「ナノスピン変換科学」と連携しながら第2期スピントロニクス研究会を企画・開催してきた。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。

本研究会では、上述のスピン変換物性に関わる研究を磁気的、電気的、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のスピントロニクス研究を先導する我が国の研究者が構成メンバーである。委員内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。

2. 2017 年度の研究活動の概要

2017 年度は、3 回の研究会を開催した。第 1 回は 4 月 14 日に、テーマを「ナノスピン変換科学のこれから」と設定し、新学術領域研究「ナノスピン変換科学」の第 2 期公募研究採択課題の研究計画を発表する研究会とした。

第2回研究会は、2017年11月15日に最近注目されている物性科学のキーワードである 量子伝導、グラフェン、超伝導、マヨラナをテーマとして研究会を開催した。光誘起スピン変換現象に注目した研究会を開催した。円偏向した光は、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、充実した議論が行われた。

第 3 回研究会は、委員長の大谷が任期最後の研究会であることもあり、東京を離れ遠刈 田温泉にて委員が話題を持ち寄り、最近の成果やスピントロニクス研究会の今後に関して 意見交換を行った。

以下に開催された3回の研究会の概要を纏める。

第1回 2017年4月14日

会場:TKP お茶の水カンファレンスセンター

テーマ:「ナノスピン変換科学のこれから -第2期公募研究採択課題発表会-」

A01 班「磁気的スピン変換班」採択公募班研究 3 課題

森山 貴広 (京都大学化学研究所)

「反強磁性体におけるスピン変換ダイナミクス」

三輪 真嗣 (大阪大学大学院基礎工学研究科)

「界面磁性を利用したスピン変換現象の研究」

関 真一郎 (理化学研究所創発物性科学研究センター)

「キラル物質を用いた新しい選択則のスピン流・電流変換現象の開拓」

森山氏は最近注目されている反強磁性体中で生じるスピントルク現象、三輪氏は絶縁体と 強磁性金属との界面の起動モーメントを電場で制御する試み、関氏が界面ではなく結晶の キラルな対称性を利用したスピン流電流変換に関する非常に興味深い研究計画について紹 介した。

A02 班「電気的スピン変換班」採択公募研究 1 課題

大塚 朋廣 (理化学研究所創発物性科学研究センター)

「スピン変換研究に向けた電気的超高速局所スピンプローブの開発と応用」

スピン変換デバイス中に形成されたスピン状態を局所的に高速に測定できる電気的超高速 局所スピンプローブを実現する研究計画が示された。

A03 班「電気的スピン変換班」採択公募研究 2 課題

小野瀬 佳文 (東京大学大学院総合文化研究科)

「強磁性体および反強磁性体におけるマグノン動力学に対するジャロシンスキー守谷相互 作用の効果」

松尾 貞茂 (東京大学大学院工学系研究科)

「偏光もつれ光子対から電子スピン対への量子もつれ相関の転写技術の開発とその実証」 小野瀬氏からは、これまでの強磁性マグノンにおける DM 相互作用の効果に関する研究をもとに反強磁性マグノンについても同様の効果が生じることを推測して行う実験計画が示された。 松尾氏からは、量子情報処理に資するコヒーレントな光子スピンの変換を実現するインターフェースを量子ドットを用いて実現する実験計画が示された。

A04 班「機械・熱的スピン変換班」採択公募研究 2 課題

畠山 温 (東京農工大学工学系)

「気体と固体、スピンでつなぐ ~スピン流生成から機械的回転まで」

能﨑 幸雄 (慶應義塾大学理工学部物理学科)

「巨視的回転運動と微視的スピン角運動量の双方向変換」

これらの採択課題は第 1 期からの継続採択である。畠山氏からは、気体原子のスピンがマクロな固体の角運動量に移行することを示す原理検証実験やその逆効果である回転する固体素子によるスピン偏極気体原子の生成などのスピン変換に関する実験経過と発展研究の提案が示された。

能崎氏からは、第 1 期に引き続き、表面弾性波を用いた巨視的回転運動と微視的スピン角 運動量の相互変換の検証実験に関する詳細な説明とこれまでの成果に関する説明がなされ た。

A05 班「スピン変換機能設計班」採択公募研究 4 課題

Tretiakov Oleg (東北大学金属材料研究所)

Spinorbitronics in Magnet/Heavy-metal Bilayers

佐藤 正寛 (茨城大学理学部)

「熱と光を利用した新しいスピン流・スピン秩序の制御に向けた理論研究」

横山 毅人 (東京工業大学理学院物理学系)

「歪みによるスピン流及び磁化生成」

石井 史之 (金沢大学理工研究域 数物科学系)

「第一原理手法によるナノスピン変換物質デザイン」

Oleg 氏からは、スピンホール効果によるスピン流によって強磁性体や班強磁性体中に生じるスカーミオンを駆動する手法やそれらのダイナミクスに関する理論研究計画の説明がなされた。佐藤氏からは、スピノン等の新しい磁気準粒子のスピントロニクス機能を開拓する理論研究と共同研究実験が提案された。横山氏からは、歪を用いたスピン流と磁化の生成手法に関する理論的な考察と実験の提案が行われた。石井氏からは、異常ネルンスト効果やエデルシュタイン効果などのスピン流電流変換現象に関する第一原理計算を用いたスピン変換物質の設計手法に関する研究計画が説明された。

第2回 2017年11月15日

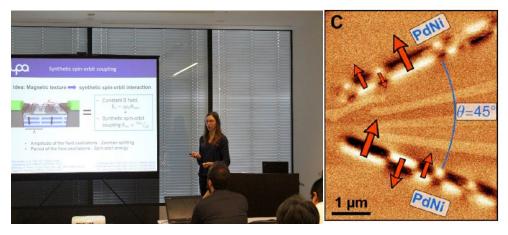
会場:TKPガーデンシティー御茶ノ水

テーマ: 「Quantum transport, Graphene, Superconductor and Majorana」

今回の研究会はグラフェンやカーボンナノチューブなどにおける超伝導接合や、マヨラナフェルミオンについて、最新の成果を挙げている国内外の研究者の方々をお招きし、合計で28名が参加した。

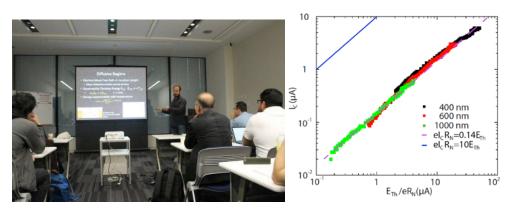
最初に、フランス Ecole normale superieure Lauriane Contamin 氏が「Synthetic spin orbit interaction for Majorana devices」という題目で講演を行った。通常スピン軌道相互作用が弱いとされるカーボンナノチューブに磁気テクスチャーを持つ強磁性体を接合させることで、人工的に強いスピン軌道相互作用を発現させることに成功した。s 波超伝導体との接合を作

製し、この強いスピン軌道相互作用を利用してゼロ磁場でゼロバイアス伝導度ピークを観測した。これはマヨラナ東縛状態が細線の両端に生成している可能性を示すものであり、 今後超伝導共振器などと組み合わせることで、マヨラナ状態の高周波分光や組紐操作を行うことを期待させる興味深い発表であった。



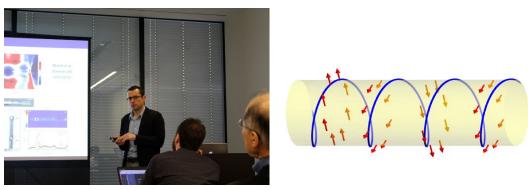
Contamin 氏の講演風景と、カーボンナノチューブに接合した強磁性体の磁気テクスチャーーの例。

続いて、東京大学の Ivan Borzenets 博士が「Graphene-Superconductor Hybrids: characterization and applications」という題目で講演を行った。グラフェンのジョセフソン接合に関する系統的な実験について発表が行われた。拡散的接合では、臨界電流が3桁のオーダーに渡って、サウレスエネルギーに比例することを明らかにした。短い弾道性接合領域では、臨界電流のエネルギーは超伝導ギャップに依存することを見出した。長い弾道性接合領域では、臨界電流は、共振器とみなしたときの共振器エネルギー準位間隔に依存するが、低温では超伝導ギャップ(あるいは共振器エネルギー間隔)と共振器中のモードの数の積に飽和することが明らかになった。このように同じデバイスでゲート電圧などの制御によって、拡散的接合と弾道的接合での短い接合と長い接合の特徴を明確に示した成果は世界で初めてである。最後にこうした良質な超伝導体/グラフェン接合の応用として、もつれ電子対生成や量子ホール状態での超伝導接合などの研究成果についても紹介があった。



Borzenets 博士の講演の様子と、長い拡散的超伝導接合デバイスで観測された臨界電流のサウレスエネルギーに対するスケーリング

最後に理化学研究所の Peter Stano 博士が、「Helical order in one-dimensional semiconductor」という題目で発表を行った。1次元半導体におけるスピンへリカル状態の実現に関する理論研究で、最近の実験を紹介して、半導体細線における核スピンのヘリカル状態の実現の可能性について議論を行った。またこうしたヘリカル状態ナノ細線との超伝導接合におけるマヨラナフェルミオンやパラフェルミオンとの関係にも議論がなされた。最初の講演者 Contamin 氏の実験とも相補的な内容であった。



Stano 博士の講演の様子と、導電性細線における核スピンへリカル状態の模式図

以上のように、低次元系における人工的なスピン秩序の形成と、超伝導体接合がもたらす新しい多体相関効果について、最新の成果について活発な議論を行った。通常の磁性体を主体とするスピントロニクス研究とは趣を異にする研究であるが、超伝導接合やヘリカルスピン秩序など、多体効果の顕著な現象として。参加者にとって大変興味深い内容であった。

第3回 2018年2月26日

会場:宮城県遠刈田温泉さんさ亭

テーマ:「研究会委員の意見交換と懇談」

委員長任期最後の研究会であるので、趣向を変えて宮城県遠刈田温泉での話題提供研究会を開催した。スピントロニクスに関する話題だけではなく、特定の状況下では高温の水の方が低温の水よりも短時間で凍ることがあるというムペンバ効果に関する興味深い話が新圧先生からなされ、大変有意義な時間を過ごすことが出来た。



3. まとめ

前スピントロニクス研究会委員長前川先生の後を引き継いでから、2期6年間が瞬く間に過ぎた。この間、研究会のメンバーに若手の優秀な研究者も加わり、多くの発展を遂げることが出来たと自負している。本研究会はスピントロニクス研究に関する議論の場を提供するだけではなく、本研究会のメンバーを中心として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ついてもその一翼を担っている。例えば、この研究会のメンバーで新学術領域「ナノスピン変換科学」を立ち上げることが出来た事により、スピントロニクスコミュニティにとっての活動基盤が今まで以上に強化された。これにより、若手や中堅の研究者の活躍も目覚ましく、IBM科学賞をはじめとする著名な科学賞の受賞者や、2年連続して文部科学大臣表彰若手科学者賞受賞者を輩出したことは注目に値する。

現在、スピントロニクス研究は、固体物理の他分野と相互作用しながら新たな飛躍を遂 げようとしている。2018 年度からアイデアマンの新委員長の齊藤英治先生にバトンを渡し た。本研究会がますます発展していくことを祈っている。

研究会開催記録

【第1回】2017年4月14日(木) 御茶ノ水

テーマ:「ナノスピン変換科学のこれから -第2期公募研究採択課題発表会-」

- 1. 「気体と固体,スピンでつなぐ ~スピン流生成から機械的回転まで」 畠山 温 (東京農工大学)
- 2. 「歪みによるスピン流及び磁化生成」

横山 毅人 (東京工業大学)

- 3. 「スピン変換研究に向けた電気的超高速局所スピンプローブの開発と応用」 大塚 朋廣 (理化学研究所)
- 「キラル物質を用いた新しい選択則のスピン流・電流変換現象の開拓」
 関 真一郎 (理化学研究所)
- 5. 「巨視的回転運動と微視的スピン角運動量の双方向変換」 能﨑 幸雄 (慶應義塾大学)
- 6. 「偏光もつれ光子対から電子スピン対への量子もつれ相関の転写技術の 開発とその実証」

松尾 貞茂 (東京大学)

7. Spinorbitronics in Magnet/Heavy-metal Bilayers

Tretiakov Oleg (東北大学)

- 8.「熱と光を利用した新しいスピン流・スピン秩序の制御に向けた理論研究」 佐藤 正寛 (茨城大学)
- 9.「第一原理手法によるナノスピン変換物質デザイン」

石井 史之 (金沢大学)

10.「界面磁性を利用したスピン変換現象の研究」

三輪 真嗣 (大阪大学)

11. 「反強磁性体におけるスピン変換ダイナミクス」

森山 貴広 (京都大学)

12.「強磁性体および反強磁性体におけるマグノン動力学に対する

ジャロシンスキー守谷相互作用の効果」

小野瀬 佳文 (東京大学)

【第2回】2017年11月15日(金) 御茶ノ水

テーマ:「Quantum transport, Graphene, Superconductor and Majorana」

Synthetic spin orbit interaction for Majorana devices
 Lauriane Contamin, Ecole normale superieure

- 2. Helical order in one dimensional semiconductors Peter Stano, RIKEN
- 3. Graphene-Superconductor Hybrids: characterization and applications
 Ivan V. Borzenets, The University of Tokyo

【第3回】2018年2月26日(月)-27日(火) 宮城県刈田郡遠刈田温泉

テーマ:「研究会委員の意見交換と懇談」

- 1.大谷 義近 (東京大学)
- 2.新見 康洋 (大阪大学)
- 3.高梨 弘毅 (東北大学)
- 4.多々良源 (理化学研究所)
- 5.大岩 顕 (大阪大学)
- 6.小野 輝男 (京都大学)
- 7.新庄 輝也 (京都大学)
- 8.水上 成美 (東北大学)

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 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 小野 輝男 教授 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 門脇 和男 副センター長・教授 兼、数理物質系 東北大学 材料科学高等研究所 齊藤 英治 教授 新庄 輝也 京都大学 名誉教授 大阪大学 大学院基礎工学研究科 鈴木 義茂 教授 附属スピントロニクス学術連携研究教育センター 東北大学金属材料研究所磁性材料学部門 高梨 弘毅 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固体電子物性講座 教授 福間 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 物質・材料研究機構 環境・エネルギー材料部門 三谷 誠司 グループリーダー 磁性材料ユニットスピントロニクスグループ 白石 誠司 京都大学 大学院工学研究科電子工学専攻 教授 東北大学 大学院工学研究科応用物理学専攻 教授 安藤 康夫 水上 成美 東北大学 材料科学高等研究所スピントロニクス材料研究室 教授 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 多々良 源 量子情報エレクトロニクス部門 大岩 顋 大阪大学 産業科学研究所量子システム創成研究分野 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

2018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

サブナノメーター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における水の役割のように、生体機能の中において、ナノスケールレベルで絶えず揺らぎながら重要な役割を、黒子のように、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1MW 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 のソフトウェアの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 2017年度は第8期の最終年度となる。委員は14名が2016年度から継続していただいた。

2. 2017 年度の研究活動の概要

2017年度は2回の水和ナノ構造研究会を開催した。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 研究会との共催のそれぞれ2回、4回を含め、計8回の研究会を実施した。

2.1 第1回水和ナノ構造研究会

(2016年10月11日(水)~12日(木)、山形県米沢市白布温泉)

第1回水和ナノ研究会は山形県米沢市白布温泉中屋別館不動閣にて行われた。外部 講師4名をお迎えし「中性子タンパク質結晶学における良質大型結晶育成法と赤外分 光法について」というテーマで開催した。

1、2人目の外部講師は、株式会社科研試験設計部の伊藤剛士氏と皆川由貴氏で、「相図に基づく結晶育成方法の展開その1、その2」というタイトルでご講演いただいた。中性子結晶構造解析のためには X 線と比べて桁で結晶を大型化する必要があり、タンパク質試料の大量生成の必要性や大型結晶化の条件検討等まだまだ準備には困難が伴っているのが現状である。iBIX の開発により従来より結晶は小型化されつつあるが、それでも実験者にとってはまだまだ準備の負荷を強いることになっており、これが中性子構造解析のタンパク質試料への適用のボトルネックとなっている。本講演においては、膜を介した二室のセルを用い、一方の結晶化セルでは体積を変化させることで Cp を制御し、もう一方の沈殿剤が入ったセルでは Cc 濃度を変化させ、膜を介して結晶化セル側の Cc を制御させる方法について詳細にご紹介頂いた。現行の装置では数少ない結晶核の生成から結晶を成長させる過程の制御が困難であり課題が存在するが、この問題点を乗り越えることで有用な方法となることが期待されるものであった。

3人目の外部講師は北海道大学の真栄城正寿氏で、「マイクロデバイスによるタンパク質の結晶化制御と構造解析への応用」というタイトルで発表いただいた。X線で高分解能データを与えるたんぱく質の単結晶の作製は試行錯誤的な方法や運に依存している。またタンパク質の結晶は脆いため、測定時の結晶のハンドリングには熟練した手技が必要である。本講演では、マイクロデバイスを用いたタンパク質の立体構造解析法についてご紹介頂いた。マイクロデバイスで生成した微小液滴を用いて、系内に単結晶を1個だけ作製する技術が開発され、また、空間サイズを精密に設計することによって、タンパク質の結晶構造解析で重要な課題の1つである多結晶化の制御が可能となっており、測定に適した結晶を作製することに成功している。中性子構造解析

用の大型結晶育成においても、多結晶化を制御し、1個だけの結晶を系内で育成する ことが理想的である。本方法が多くのタンパク質に適用可能な方法として確立されれ ば、中性子構造解析用の大型結晶育成に対しての応用が期待できるものであった。 4 人目の外部講師として、理科学研究所放射光科学総合研究センターの久保稔氏に講演 をお願いした。「XFEL 結晶構造解析と赤外分光法を用いたタンパク質の動的精密構造解 析」というタイトルで発表頂いた。タンパク質の機能メカニズムを理解するためには、 タンパク質が機能する姿を高分解能で捉えることが必要である。現在、原子分解能かつ フェムト秒時間分解能でタンパク質のダイナミクスを可視化できる唯一の手法は、時間 分解X線結晶構造解析である。本講演では理研播磨のXFEL(施設名SACLA)を用い て、時間分解 X 線結晶構造解析の装置を開発し、種々のタンパク質に適用した例をご 紹介頂いた。特に光駆動プロトンポンプの研究では、機能発現時に現れる 13 の過渡構 造を解析し、それらを繋いで分子動画を作成することに成功している。また、タンパク 質機能の十分な理解のためには赤外分光法を組み合わせた解析が必要であり、本講演で はフェムト秒赤外レーザーを用いた、独自の高感度時間分解赤外分光装置の開発とタン パク質の機能発現時の過渡的状態解析への適用についてご紹介いただくとともにそれ らを相補利用した一酸化窒素還元酵素の反応機構研究についてご紹介いただいた。

すべてのご講演で委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。

2.2 第2回水和ナノ構造研究会

(2018年3月6日(火)~7日(水)、宮城県大崎市鳴子温泉)

第2回の水和ナノ構造研究会は「中性と相補的な X 線、NMR、極短パルス光がとらえるタンパク質の最新構造情報」というテーマで宮城県大崎市鳴子温泉郷中山平温泉仙庄館にて開催した。3名の外部講師をお招きした。

1人目の外部講師は、首都大学東京の三島正規氏で、「NMR meets Neutron on the cutting edge」というタイトルでご講演いただいた。NMR スペクトルは測定対象となる分子の化学的環境を明敏に反映し、生体分子の立体構造解析を行う際にも、対象分子の性質や複合体形成をモニターすることで、様々な情報を収集し、フィードバックしつつ解析を行うことができる特徴的な構造解析手法である。これらを構造生物学研究へ適応した例として、転写抑制コファクターであるSHARP とSMRT 複合体、微小管プラス端伸長因子CLIP と α -tubulin 複合体の構造研究について紹介いただいた。また、GDP 型Rasタンパク質において、GDP のリン酸基とRas タンパク質の主鎖のアミド基の間に形成される水素結合において、4 Hz以上という大きなスピン結合が存在することを発見されており、その測定のNMRパルスシーケンスであるHNPO 法の開発と最近の水素結合研究についてご報告いただいた。正確な水素の位置が得られる中性子結晶構造解析と、NMR による水素結合を介したスピン結合の観測を合わせた研究の可能性についてもお話があり、

非常に有意義な公演であった。また、タンパク質試料の重水素化についてもNMRでは精力的に行われており、中性子回折におけるタンパク質試料の完全重水素化に対しても適用の可能性があることが分かり、今後の相互発展を期待させるご講演であった。

2人目の外部講師は理化学研究所の倉持光氏で、「極短パルス光を用いた光応答性タンパク質の実時間構造ダイナミクス追跡」というタイトルで発表いただいた。化学反応では結合の開裂・生成を伴って分子の構造が変化するため、その過程で分子内の核配置がどのように変化していくかを知ることが化学反応を理解する上で重要であり、このためには分子構造の変化を高い時間分解能で観測することが必須である。講演では講師が取り組んできた可視6fsパルスを用いた時間分解インパルシブラマン分光装置の開発と、それを用いて明らかにした光応答性タンパク質における超高速構造ダイナミクスについて紹介いただいた。時間分解インパルシブラマン分光装置の詳細な原理から、その適応まで非常に詳細に詳しくご講演いただき、中性子による静的な構造情報とダイナミクス研究との相補的な利用により、反応機構に対するさらなる理解が進むことが期待されるご講演であった。

3人目の外部講師は量子科学技術研究開発機構の玉田太郎氏で、「中性子とX線を相補 的に用いたタンパク質の構造解析」というタイトルで発表いただいた。X線回折が原子 核を取り巻く電子からの回折現象であるのに対し、中性子回折は原子核そのものから生 じる回折現象であり、同じ原子を観測してもその位置や見え方に特徴的な差が生じる。 中性子とX線の特徴的な違いをうまく利用した構造解析を行えば、タンパク質が関与す るさまざまな生命反応をより深く理解することが可能になると思われる。講演者はこれ らの量子ビーム(中性子とX線)の相補的な性質を利用して、医学生物学的に重要なタ ンパク質の立体構造解析を進めており、本講演ではJRR-3のBIX3で行われた創薬標的タ ンパク質エラスターゼの構造解析については、中性子の特徴を生かした反応中間体状態 における水素結合と酸素陰イオンの状態を解明している。iBIXを用いた電子伝達タンパ ク質である高電位鉄硫黄タンパク質の構造解析については、非常に高分解能のデータ収 集に成功し、高精度なプロトン化状態の観測がなされていた。iBIXにとっては装置性能 を示す意味でも非常に良いデータが得られていた。また、J-PARCに設置を検討している 新たな回折計についてのご紹介があった。中性子回折の特徴とX線との相補的な利用の 有用性について非常にわかりやすくお話しいただき、大型結晶育成の条件や凍結条件の 最適化等の試料準備も含めて、非常に有意義な講演であった。





第二回研究会の様子

2.3 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。

2.3.1 平成 29 年度茨城県 iBIX 研究会:

第1回 iBIX 研究会 平成29年6月28日 玉田 太郎氏(量子科学技術研究開発機構) 「電子伝達タンパク質の中性子結晶構造解析」

第2回 iBIX 研究会 平成29年11月16日 片岡 幹雄氏 (熊本大学)

「イェロープロテインの構造と光反応」

第3回 iBIX 研究会 平成30年1月31日 山縣 ゆり子氏 (熊本大学)

「酸化ヌクレチド分解酵素の基質認識と反応過程」

2.3.2 平成 29 年度 iBIX-JAXA 合同タンパク質研究会

「iBIX の紹介」

日下 勝弘 (茨城大学)

「JAXA 高品質タンパク質結晶生成プロジェクトの紹介」 吉崎 泉 (JAXA)

「良質な結晶育成へ向けた我々の取り組み」

山田 貢 (JAXA)

「iBIX 結晶化の取り組みと結晶化とは」

山田 太郎 (茨城大学)

今野 美智子(茨城県)

「微小重力下での大型結晶生成にむけた技術開発」 五十嵐 圭日子(東京大学) 「良質なタンパク質結晶を得るための手法」

千田 美紀 (高エネルギー加速器研究機構)

「宇宙実験での最近の成果」

阪本 泰光 (岩手医科大学)

「中性子構造解析を中心とした手法で解明する

光合成色素フィコシアノビリンの合成メカニズム 海野 昌喜(茨城大学)

2.3.3 中性子產業利用推進協議会 構造生物学研究会:

平成29年度第1回生物構造学研究会

『中性子構造生物学の最前線』

(平成29年9月11日(月)、研究社英語センター大会議室)

「J-PARC MLF の現状と中性子産業利用」

富田俊郎 (茨城県)

「iBIXの現状」

日下勝弘(茨城大学)

「日本の創薬を活性化するために果たすべき AMED の役割

善光龍哉 (AMED)

「世界の中性子構造生物学の未来像とそのために

日本の中性子構造生物者が果たすべき役割し

杉山正明(京都大学)

「iBIXによる長格子カタラーゼの中性子単結晶回折」

山田太郎(茨城大学)

「タンパク質単結晶の回折斑点の高精度解析法の開発」

矢野直峰 (茨城大学)

「高分解能 X 線および中性子構造解析による

酸化型銅アミン酸化酵素の活性中心構造し

岡島俊英(大阪大学)

「磁場配向技術の結晶構造解析への応用」

坪井千明 (旭化成ファーマ)

「ナノ粒子の溶液中での精密構造解析」

櫻井和朗(北九州市立大学)

「構造生物学から迫るオートファジーの分子機構」野田展生(微生物化学研究所)

平成29年度第2回生物構造学研究会

『新世代中性子構造生物学』

(平成30年3月29日(木)、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)

「I-PARC MLF における生命科学に関わる実験装置の現状と将来」山田 武 (CROSS) 「中性子結晶構造解析の可能性ーイェロープロテインの構造と光反応」

片岡幹雄 (CROSS)

「アカデミアにおける初期創薬イノベーション

ーもと製薬会社研究員の考える化合物探索 一」 阪下日登志 (産総研)

「タンパク質を膜透過させるSec タンパク質の構造生物学」塚崎智也(奈良先端大) 「ピロリ菌がんタンパク質CagA の構造・機能とその制御」

畠山昌則(東京大学・医学部)

「NMR を用いた膜タンパク質のin situ 機能解明 嶋田一夫 (東京大学・薬学部) 「タンパク質の大規模運動を伴った機能発現のシミュレーション研究」

木寺詔紀(横浜市立大学)

3. 第8期活動の総括(成果と今後)

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。しかしながら中性子源ターゲットの冷却水 漏洩等により、2017 年度 6 月までは 150kW での運転にとどまってきた。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、 iBIX のタンパク質の測定数が制限されてきた。 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、中性子の特徴を生かした新たな成果が得られている。iBIX は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、 135X135X135Å3の格子体積のタンパク質結晶の測定が可能となるよう設計されている。 前者はタンパク質標準試料の測定により 2012 年度に実証済みであり、2016 年度には、 133. 4X133. 4X133. 4Å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 2.4Å分解能の中性子回折データを取得し、構造解析の結果、水素原子の観 測に成功している。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ている。昨年度には建設 から10年を迎え、第1期の設置契約期間が終了し、2017 年度に J-PARC、 MLF への 再設置申請を行い、実績評価及び次期計画評価調書を提出、ヒヤリングを経て 2018 年度から10年間の再設置が認められた。

本研究会の活動の目的の一つである iBIX におけるソフトウェアの改良については、研究会においてもその進捗や問題点、その解決策等が議論され、現在はユーザーがより簡単にデータ処理が可能なまでにユーザビリティーを向上することができた。

J-PARC、 MLF では 2017 年夏に不具合が修正された新たなターゲットが導入され、2018 年 3 月現在では 400kW での運転がなされており、2018 年 4 月からは 500kW での運転が予定されている。また、2018 年度中には 800kW までの増強が予定されている。iBIX は設計通りの性能が実証され、J-PARC の加速器出力も 2018 年度には最大出力 1MW に近い運転が予定されている。本研究会の今期の活動においては、大型結晶育成法も含めて、実験分野及び計算科学研究者に生体高分子中の水やプロトネーションについて様々な議論を進めていただくことができた。第 2 期(第 9 期)からは、装置自身の高度化を継続しつつ、中性子回折の特徴を生かし産業利用を意識した成果の創出をさらに精力的に進めるべき段階に移行しており、本研究会での活発な議論により中性子利用と関連分野の発展が本格的に加速することを期待するところである。

研究会開催記録

【第1回】2017年10月11日(水)-12日(木) 山形県米沢市白布温泉 テーマ:「中性子タンパク質結晶学における良質大型結晶育成法と 赤外分光法について」

1.「相図に基づく結晶育成方法の展開 その1」 伊藤 剛士 (株式会社化研)

2.「相図に基づく結晶育成方法の展開 その2」 皆川 由貴 (株式会社化研)

- 3.「コメント 『大型高品質タンパク質単結晶と微小重力(宇宙)空間』」 新村 信雄 (茨城大学)
- 4.「マイクロデバイスによるタンパク質の結晶化制御と構造解析への応用」 真栄城 正寿 (北海道大学)
- 5.「XFEL 結晶構造解析と赤外分光法を用いたタンパク質の動的精密構造解析」 久保 稔 (理化学研究所)

【第2回】2018年3月6日(火)-7日(水) 宮城県大崎市鳴子温泉

テーマ:「中性子と相補的な X 線、NMR、極短パルス光がとらえる タンパク質の最新構造情報」

1. $\lceil NMR$ meets Neutron on the cutting edge \rfloor

三島 正規 (首都大学東京)

- 2.「極短パルス光を用いた光応答性タンパク質の実時間構造ダイナミクス追跡」 倉持 光 (理化学研究所)
- 3.「中性子と X 線を相補的に用いたタンパク質の構造解析」 玉田 太郎 (量子科学技術研究開発機構)
- 4. 「フリーディスカッション」

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

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

冨田 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

2018年3月現在

ナノカーボン、次の一手

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 s p 2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。構成委員を中心に、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. 2017年度活動の概要

まだ、私が都立大の助手になりたての頃、研究室所属の卒研生が教員に文句を言っていた。「この測定が終わったら、もう実験は終わりだって言ってたじゃないですか!」そう、かなり大変な測定が終わったところで、実験を追加されたのだ。それに対して担当教員は一言、「研究には、これで終わりってものは無いんだ。」もちろん、学生は全く納得しなかったが、プロの研究者になりたてだった私は、なるほどそういうものかと意外にも感慨深く思ったものだ。昨今の大学では、こんなやり取りはご法度なのかも知れないが、当時はまあ普通だった。その証拠に当該学生は、修士まで進学した。そこで彼が研究の深淵に触れたかどうかは良くわからない。その後も彼は類似の文句を繰り返していたからだ。まあ、それはともかく、確かに研究には終わりがない。何か一つ解決すれば、次の疑問が湧き上がる。これは、言い換えれば次の楽しみが生まれるということだ。研究者はその新たなネタを楽しみたいと思う。しかし、それを楽しむ原資には限りがある。研究を続けるのは、実はそれほど楽ではない。

ナノカーボン研究会の委員長を拝命して3年が過ぎ、2017年度で一期目が終了した。 同年度、齋藤先生の率いる新学術領域「原子層科学」が数多くの成果とともに幕をおろ した。私の基盤 S も同時に終了した。いろいろな節目となった 2 0 1 7年度であった。 大型予算が終了すると、それに専属で従事していたポスドクなどは、得られた成果を手に、新たな職を探して旅立って行く。一方、我々プロの研究者は次のプロジェクトを立ち上げなければならない。終わりは始まりでもある。そこで常に考えているのが「次の一手」だ。以前、友人の将棋指しに聞いたところ、アマチュアでも 100 手くらいは読むという。おそらく、優秀なプロの研究者なら、研究でもかなり先読みするのかも知れない。しかし、私はせいぜい次の一手だ。次の3年から5年間しのげる研究費があれば、その間に何か成果が上がり、その次のネタができるでしょうと気楽に考えて、いままで何とか凌いで来た。しかし、ナノチューブ発見から25週年、状況はなかなか厳しくなってきた。

新材料の発見から、それが実際に社会に出ていくまでには、基礎研究のあと、応用、 用途開発、実用化、製品開発、商品化・社会実装(?)と、何通りもの言葉で表現され る「応用研究」がある。ナノカーボン材料は発見から今日まで歴史が浅く、いかに研究 のスピードが上がった今日でも、まだお店で買う日用品に使われている例は殆ど無い。 私の持論として、今後永久に人類に貢献する見込みのない研究は、たとえそれが純粋な 科学であっても税金でサポートしてもらうことはできないと考えている。社会貢献の無 い研究は、自費で行うべきである。税金で研究を行うなら、それがたとえ 1000 年後で あったとしても、人類に貢献するという明確なビジョンがなければならない。その点、 ナノカーボン材料はポテンシャルの高い新材料として、多くの注目を集め、順調な進展 を見せてきた。しかし最近、類似のプレスリリースが繰り返されるたび、報道に関わる 方々からは、「今回は前回とどこが違うんですか?」と聞かれるほど、研究には停滞感 があるのも事実だ。研究のスピード感は、まっとうな状態だと当事者からすれば思うの だが、発見当初話題になったぶん、そのつけが回ってきたという側面もあり、将来役に 立つ新素材という看板はもう効果を発揮しなくなりつつある。すぐにでも役に立つのだ が、その前にもう少しだけやることがある。そんな気持ちで、応用の細かな段階に名前 をつけたのが、上記の多様な応用研究の名称なのではないだろうか。

このような状況で、ナノカーボン材料の研究環境を維持するには、もう少し真剣になって、実用化の検討を進める必要がある。産総研では、その名の通り「ナノチューブ実用化研究センター」なるものを発足させ、実用化を目指した研究を行っているが、近未来の実用化を目指すあまり、ハードルの高い電子デバイス応用についてはあまり取り扱っていない。米国でナノチューブの集積回路を試作する若手研究者がいるのと対象的である。そこで、ナノカーボン研究会では、電子デバイス応用がより進んでいる有機半導体の代表的研究者を講師として招聘し、有機デバイスはどこまで進んでいるか、何が長所で何が欠点か、本当に実用化が進むのかなど、基本的なことを勉強させていただくことにした。ライバルを学ぶというわけだ。例年、夏と冬に研究会を開催しているが、2017年度は夏の蔵王での研究会に、東京大学の竹谷先生をお呼びした。一方、冬の研究会で

は、メンバーの先生方にお願いしようと言うことで、研究会のテーマを「次の一手」と題し、知恵を出し合うこととした。

- 3. 8期活動の総括(成果と今後)
- 3.1 2017年度の活動
- 3.1.1 第一回研究会「蔵王17研究会」

今やナノカーボン研究会の恒例行事となった、蔵王研究会である。宿の手配は東北大の齋藤先生にお願いしており、その他のことは ATI の方々がやっていただけるので、私はただお客さんのように仙台駅に向かうのみで、後はホテルのバスが送迎してくれる、私にとっては大変楽ちんな会議となっている。今回の研究会は、いつもと異なる2つの取り組みを行なった。一つは、外部から講師をお招きして、有機半導体のデバイス応用について、講義していただくこと。もう一つは、メンバー全員が話題提供するのではなく、数名の講師の先生を決めて、通常よりも長く時間をとって講演していただき、ゆっくり議論するということである。外部の先生にも講義をお願いするので、講義3件と若手研究者15名による各15分のプレゼンという、やや変則的な構成となった。参加した若手研究者としては、3名の先生の講義を受け、自らも研究発表するという感じで、なかなか良い構成のようにも思う。なお、発表言語は例年通り英語である。以下、具体的なトピックに触れる。

Junichi Takeya, Charge transport and integrated circuits of organic semiconductors 東京大学の竹谷先生による有機半導体による集積回路の実用化直前の話題である。有機 半導体といえば、基本的に絶縁体であるから、トランジスタを作製した場合、基本的に OFF 動作は良いが、ON 電流を確保するのが難しそうという印象があった。高移動度 のデバイスも報告はあるが、それは微小な単結晶を使ったもので、大面積の薄膜デバイ スとして用いる実用デバイスとは別物の、研究目的のものであると考えていた。したが って、有機デバイスは極めて低速動作で耐久性も無いと。しかし、竹谷先生の示された 内容は大きく異なっていた。まず、有機半導体の伝導メカニズムを真面目に考察し、ど のような素材が望ましいか検討し、その素材をインチサイズの薄膜状に単結晶化する簡 便な手法を考案し、その単結晶薄膜を使って集積回路を作製するという、想像を遥かに 超えたハイレベルの成果を披露された。移動度は 16 cm²/Vs に達するという。この値は、 確かにナノチューブのチャンピオンデータと比較すると二桁程度低いということにな るが、実際にナノチューブで薄膜デバイスを作製すると、この値と大きく違わない移動 度のトランジスタしかできない。ナノチューブを使ったとしても、この移動度を大きく 上回るトランジスタを作製するのは決して容易ではないのだ。しかも、ナノチューブの トランジスタの特性は、ナノチューブ薄膜内のネットワーク構造に大きく依存するため、 安定して特性を再現するのは容易ではない。それに比べ、有機半導体では単結晶を用い ているため、単結晶作製技術が確立されれば、デバイス特性は安定化する。これは遥か

に扱いやすいと感じた。乱暴な話、有機デバイスの場合、きれいな薄膜状の単結晶さえできてしまえば、後は通常の技術で集積回路の作り込みが可能なはずである。実際に実用レベルに近い集積回路を作製し、製品レベルの耐久性テストも行っているとの事であった。

こうなると、ナノカーボン陣はおちおちしていられないという感じである。ナノカーボン材料の「売り」はディラックコーンで象徴される電子状態に由来する高い移動度である。Si を遥かに上回る移動度が、次世代デバイスに有効であると主張している。しかし、実際のナノカーボン材料は問題だらけである。驚異的な移動度を示すグラフェンは、肝心のギャップが開かないため、デバイスにすらならない。有意なギャップが開くカーボンナノチューブは、少し構造が変われば金属になってしまい、チャネルがショートしてしまう。うまく半導体型を分離するには、超音波で粉々に分散する必要があり、この処理で欠陥が導入されると、肝心の移動度が下がってしまうという、ジレンマがある。では、合成時に構造を制御し、半導体型のナノチューブだけ製造できるかというと、可能性は見えて来ているが、まだまだ実用化は遠い。他の二次元材料で、すぐに使える

物があるかというと、思いつかない。このような体たらくでも、なんとなく安心していたのは、有機半導体よりは移動度が高く、有益な材料だと信じていたからである。しかし、敵も昼寝をしていたわけでは無かったということだ。こうなると、ナノカーボン材料の得意技、高移動度で攻めるしか無い。そのためのストラテジは……温泉に浸かりながら考えたのであった。



蔵王 17 研究会 竹谷先生の講義風景

Susumu Saito, Donors, acceptors, and their ionization energies in 1D and 2D B-C-N atomic-layer semiconductors: Band-structure engineering via electron correlation and interaction between impurities

東工大の斎藤晋先生からの話題提供である。斎藤先生は、話題が豊富であり、通常の 講演時間ではいつも時間が足りず、お互いに満足の行く議論ができないという印象であ ったため、今回1時間の時間を設定し、じっくりお話を伺った。理論家の先生の話を英 語で聞くのは、私には結構骨が折れる作業である。頂いたプレゼン資料を見直しながら 印象に残ったところを紹介すると、「不純物準位とは何か?」という問いかけである。 第一原理計算を用いて、カーボンナノチューブの構造で、1個の炭素をホウ素に置き換

Masako Yudasaka, Near-Infrared Photoluminescent Carbon Nanotubes for Imaging of Brown Fat

産総研の湯田坂先生による、カーボンナノチューブを使った褐色脂肪組織の近赤外蛍 光造影の話題である。この話も非常に面白いので、是非じっくり聞かせていただきたい と思ってお願いしたのだが、英語での講演というのが、思った以上に大きな障害になっ た。この話題ではバイオ関連の用語が多数登場するが、会場のメンバー、若手研究者の 多くが無機系の研究者であり、バイオ系の専門用語に疎いのだ。日本語ならある程度知 っているバイオ系の用語も英語になると語彙力が足りない。もちろん、湯田坂先生も事 情は良くご存知なので、逐次日本語訳付きでご講演頂いたが、難解であった。とはいえ、 海外からの若手研究者には、なかなか良い刺激になったのではないかと思っている。内 容は、カーボンナノチューブで、褐色脂肪組織が選択的に光るという話なのだが、これ がどれほど面白いのかは、まずネットで褐色脂肪組織と、メタボリックシンドロームで 検索すると良い。

3.1.2 第二回研究会(野地温泉)「次の一手」

2018 年 2 月には「次の一手」と題した第二回研究会を野地温泉で開催した。通常の形式に戻し、各メンバーから次の一手につながる話題提供をしていただいた。東北大の齋藤先生のところは、学生の辰巳さんから光のヘリシティーとラマン散乱に関する話題をいただいた。光の持つ角運動量が物質との間でやり取りされるという話で、非常に興味深い話であった。理論は難解だったが、実験的に簡単に検証できると言うことで、なかなか面白そうである。一方、名大の北浦先生によれば、新しい材料が新しい研究分野を開拓するはずで、今や原子層材料の人工へテロ接合は数え切れないほど多様な種類合成可能になっているので、数えきれないほどの研究課題があるとの、非常に頼もしい意見をいただいた。理科大の本間先生は、ピラーに架橋した一本のナノチューブのラマン散乱の偏光依存性からフォノン物性を真面目に解析し、こういった真面目な研究の先に、次の一手となる新たな課題が見えてくるとの見解を述べられた。榎先生はちょうど Phys. Rev. Applied のドレッセルハウス先生の特集号の論文がアクセプトされたところということで、その内容をご紹介いただいた。ナノグラフェンベースのマイクロポアに、小

さなヘリウム原子が侵入して、磁性が大きく影響を受けるという現象から、He 検出という応用を提案したという、かなり難産の論文のご紹介だった。まさに純粋な科学も切り口を考えれば、ちゃんと応用につながるという例で、この辺のバランスが難しい。名大の大野先生からは、ナノチューブによるアナログ集積回路の話題であった。ナノチューブの次の一手となるべき大本命の課題であると期待している。ナノチューブは、素材としてはいろいろ問題があるが、大野先生の手にかかれば、そこそこ動くデバイスができるという例を見せていただいた。しかし、半導体ナノチューブの移動度が低いという問題が浮き彫りとなった。富士通の大淵先生は、ナノチューブと界面活性剤の相互作用を第一原理計算で求めた例を示していただいた。まさに、産総研で進めている分離技術の援護射撃である。若林先生には、ベリー曲率という、なにやら難しい概念を教わったように記憶しているが、定かでない。こういう講演は、研究資金の獲得の話題で凝り固

まった脳みそをもみほぐしてくれる作用があり、少し爽やかな気分にさせてくれる。やはり、科学はたとえ理解できなくても楽しい。

以上、駆け足で紹介したが、結局次の一手は自分の足元にあるということなのだと思う。ナノカーボン材料が世の中に認められるかどうかは、世の中が決めることであり、自分は自分のできるベストを尽くすしか無いなどと、まるで高校球児のような感想で締めくくるのであった。



第二回研究会 熱心に議論

3.2 8期活動の総括と今後

個人的には元気の無い状況でスタートした8期であったが、徐々に元気を取り戻し、何とか乗り切る事ができた。勢いが落ちてきた事を否めないナノカーボン材料、その一方でますます多彩さを増す原子層材料。応用で勢いを増すライバル勢。ナノ材料は確実に進歩しているが、実用化という課題を突きつけられると、なかなか思うように技を繰り出すことができない。しかし、委員の先生方の協力のもと、課題は浮き彫りになったように思う。次期には、次の一手を何とか具現化したい。そのために、このナノカーボン研究会を大いに利用させていただこうと考えている。まずは蔵王でスタートする。

研究会開催記録

【第1回】2017年8月9日(水)-10日(木) 山形県山形市蔵王温泉 8月9日(水)

Invited talk:

 Donors and acceptors and their ionization energies in 1D and 2D B-C-N atomic-layer semiconductors: Band-structure engineering viaelectron correlation and interaction between impurities

Susumu Saito, Tokyo Institute of Technology

 Charge transport and integrated circuits of organic semiconductors Junichi Takeya, The University of Tokyo

Contributed talk:

1. Controlling vibrational modes by ultrafast laser pulses

A. R. T. Nugraha, Tohoku University

- Effect of charge accumulation at domain boundaries on band bendingin MoS2
 Tomoaki Kaneko, Tohoku University
- Photon Reabsorption Effect in Optical Measurements of Single-WallCarbon Nanotubes
 Xiaojun Wei, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
- 4. Development of high performance gels for metal/ semiconductor separation of SWCNTs Guowei Wang, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
- Magnetic susceptibility in two-dimensional electron gas with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling

Intan F. Hizbullah, Tohoku University

- 6. Optical properties of multilayer dielectric stacks
 - M. Shoufie Ukhtary, Tohoku University
- Theory of exciton effect by most localized Wannier function
 Toshiya Shirakura, Tohoku University

8月10日(木)

Invited talk:

- Near-Infrared Photoluminescent Carbon Nanotubes for Imaging of Brown Fat
 Masako Yudasaka, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
 Contributed talk:
- 8. Field-effect transistors using horizontally-aligned SWCNTs

 Taiki Inoue, The University of Tokyo
- 9. Interlayer excitons in high-quality MoS2/WS2 vertical heterostructures

Tetsuki Saito, Tokyo Metropolitan University

Helicity-exchange of first-order Raman spectra in graphene and TMDs
 Yuki Tatsumi, Tohoku University

Valley polarization of hexagonal lattice by broken inversion symmetry
 Kazu Ghalamkari, Tohoku University

12. Molecular Beam Epitaxy growth of transition metal dichalcogenide atomic layers

Takato Hotta, Nagoya University

13. Thermoelectric properties of WS₂ nanotube networks

Yohei Yomogida, Tokyo Metropolitan University

14. Is there an upper limit of thermoelectric figure-of-merit?

Nguyen T. Hung, Tohoku University

15. Theory and simulation of near-field enhanced Raman spectroscopy

Fenda R. Pratama, Tohoku University

【第2回】2018年2月12日(月)-13日(火) 福島県福島市野地温泉 テーマ:「次の一手」

- 1. 「光のヘリシティに依存したレイリー散乱およびラマン散乱の角運動量保存則」 辰巳 由樹 (東北大学大学院理学研究科 PD)
- 2. 「経済産業省への一年間の出向を振り返って」

田中 丈士 (產業技術総合研究所)

3. 「TMDC 原子層へテロ構造の光学応答」

北浦 良 (名古屋大学)

4. 「単一架橋 CNT を用いたラマン分光: CNT フォノン物性再考」 本間 芳和 (東京理科大学)

5. 「CNT バイオプローブが示す血管構造変化」 湯田坂 雅子 (産業技術総合研究所)

6. 「ウェアラブルセンサの実現に向けた柔軟なカーボンナノチューブアナログ集積 回路の設計と試作」

大野 雄高 (名古屋大学)

7. Topological States in absence of Berry Curvature

若林 克法 (関西学院大学)

- 「カーボンナノチューブと分子の相互作用」
 大淵 真理 ((株) 富士通研究所)
- 9. 「Magnetism of nanographene-based microporous carbon and its applications: Interplay of edge geometry and chemistry details in the edge state」

榎 敏明 (東京工業大学)

10. 「カーボンナノチューブの分離:次の一手?」 片浦 弘道 (産業技術総合研究所)

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 機能物質科学研究部 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 大学院理学研究科物理学専攻 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

2018年3月現在

2017年度バイオ単分子研究会活動報告 一機能するタンパク質を活写する―

委員長 西野 吉則 北海道大学 教授

1. 研究構想

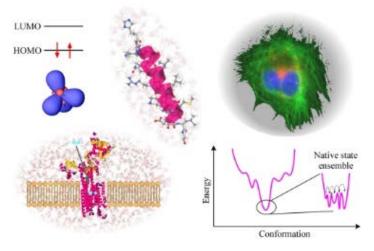
バイオ単分子研究会は、ATI 研究会第 6 期の 2009 年度に発足した研究会である. 第 6 期 (2009~2011 年度) および第 7 期 (2012~2014 年度) では、佐々木裕次教授(東京大学大学院新領域創成科学研究科)が委員長を務めた. 第 8 期 (2015~2017 年度)では、西野が委員長を務めている. 第 8 期におけるバイオ単分子研究会を始めるにあたり、以下の研究構想を描いた.

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う、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



(図1) ATI 研究会第8期でのバイオ単分子研究会の構想図

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.

2. 2017年度の研究会活動の概要

2017年度は、以下に詳述するように、バイオ単分子研究会を2回開催した.

2.1 2017年度第1回バイオ単分子研究会(2017年9月11~12日)

2017年度第1回バイオ単分子研究会は、杤尾豪人委員に座長をお願いして企画を進めた.研究会のテーマと副題は、杤尾委員に幾つかご提案いただき、「タンパク質の作動原理の理解へ向けて 一機能する姿を活写する一」とした.研究会の講演者は、杤尾委員と相談して人選を行い、杤尾委員に加え、内橋貴之先生(名古屋大学)、五十嵐龍治先生(京都大学)、渡邉力也先生(東京大学)にお願いした.

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.1日目の研究会は,富山市の呉羽ハイツを会場に行った.2日目の見学先は,これまでの研究会で多くの要望のあった,スーパーカミオカンデを選んだ.

2.1.1 タンパク質の作動原理の理解へ向けた研究会

1人目の発表は、杤尾豪人委員が「NMR を使ったタンパク質の in situ 解析の最近の 動向」という演題で行った.核磁気共鳴(NMR: Nuclear Magnetic Resonance)は,水 溶液中のタンパク質の立体構造やダイナミクスを測定できるユニークな手法として広 く用いられている. NMR で用いられるラジオ波は生体や細胞を非侵襲的に透過するた め, in-cell NMR によって, 生きた細胞内のタンパク質の構造・相互作用・ダイナミ クスも調べることができる.in-cell NMR は,2001 年に UCSF の V. Dötsch らによって 生きた大腸菌中の生体高分子の異各種多次元 NMR スペクトルが計測されたことに始ま る (Z. Serber et al., JACS 123, 2446 (2001)). 細胞内には多種多様な生体分子が 存在し,そのままでは MMR 測定ができない.このため,細胞内の着目するタンパク質 を安定同位体核種(¹³C, ¹⁵N, ²H など)で標識する必要がある. 大腸菌では, ¹⁵N や ¹³C を 含む栄養源を用いることにより、大量発現するタンパク質を標識できる.一方,ヒト 体細胞に対しては,検出可能な NMR スペクトルを得るために,大量の細胞(1 測定で 106~107個)が必要となり、技術的困難を伴う、杤尾先生らは、細胞膜透過性ペプチ ド (CPP: Cell Penetrating Peptide) などの技術により, HeLa 細胞に対する in-cell NMR を実現した. 応用例として, 水素交換実験と in-cell NMR を組み合わせた実験手 法による,細胞内でのタンパク質のフォールディング安定性の解析などの研究が紹介 された. また, in-cell NMR の将来的な発展には, NMR 装置の更なる高感度化が必須で あることが強調された.

2 人目の発表は、京都大学の五十嵐龍治先生が「量子センサーによる一分子計測」

という演題で行った、電子等の量子状態は、磁場・電場・温度等の外界の変化に非常 に敏感で、これを利用すると高感度なセンサーに応用できる、量子状態の利用や制御 には、ほとんどの場合、極低温が必要であり、生命科学への応用は困難であった. 1997 年にケムニッツ工科大学の J. Wrachtrup のグループは、ダイヤモンド窒素-空孔中心 (NVC: Nitrogen-Vacancy Center) の量子現象が常温・常圧で観測可能であることを 示した (A. Gruber *et al.*, Science **276**, 2012 (1997)). これにより量子センサーの 生命科学への応用に道が拓かれた.ダイヤモンド NVC を用いた光検出磁気共鳴 (ODMR: Optically Detected Magnetic Resonance) 顕微鏡は、①量子の状態を光を用いて初期 化し、②外界の影響をマイクロ波を用いて量子に書き込み、③量子の状態を光を用い て読み取る. ①初期化と③読み出しを光を用いて行っているため, 通常の蛍光顕微鏡 の装置を利用できる点が大きなメリットである. 計測方法は 2 つに大別され, 1 つは ダイヤモンド基板上に計測対象を置く方法で、もう 1 つはダイヤモンドをナノ粒子化 して計測対象に導入する方法である.後者のナノダイヤモンド量子センシングとナノ 粒子の位置制御技術を組み合わせることにより、細胞内の特定の微小空間において、 温度, 電場, 磁場, 粘度などといった様々な物理量を直接計測できるようになる. ODMR は開発途上の技術であるが、質・量共に NMR を遥かに超えるものとなる可能性を秘め ている.

3 人目の発表は,名古屋大学の内橋貴之先生が「高速原子間力顕微鏡による生体分 子のダイナミクス計測」という演題で行った. 通常の原子間力顕微鏡 (AFM) では1画 像取得するのに分オーダーの時間を要するのに対し、内橋先生らが携わり実現した高 速 AFM では, 生理機能や弱い分子間相互作用を乱すことなくタンパク質の動態を 10 fps 以上のフレームレートでイメージングできる. これまでの生体分子のダイナミクス解 析への応用例として、セルロースを分解しながら一方向に運動するセルラーゼ、バク テリオロドプシンの光応答,回転軸のない F1-ATPase の構造変化の回転伝搬,アネキ シン V の 2 次元結晶のダイナミクスなどの観察結果が紹介された. また, タンパク質 分子の動態を観察しながら,その分子を操作できるインターラクティブモードの開発 により,アクチン線維上のミオシン V の後ろ足を外すことで,ミオシン V が ATP なし でも前に進むという,定説を覆す現象が観察された.最近の技術的展開として,昇温 機能,電気化学計測,広範囲スキャナー,光学顕微鏡との複合化,高速 AFM/蛍光顕微 鏡複合機の開発などが紹介された.さらに,最近の一分子計測への応用例として,東 京大学の濡木理教授らとの共同研究で行ったゲノム編集ツール CRISPR-Cas9 による DNA 切断過程の観察や、岡山大学の竹居孝二教授らとの共同研究で行ったエンドサイ トーシスにおける膜切断分子(ダイナミンーアンフィファイジン複合体)による膜切 断過程の観察について紹介された.

4 人目の発表は、東京大学の渡邉力也先生が「マイクロチップを利用した膜タンパク質の単分子計測」という演題で行った、渡邉先生らが膜輸送体の 1 分子機能解析に

向けて独自開発を行っている,生体膜マイクロチップについて講演された.マイクロチップを利用したバイオ分析の技術発展は近年目覚ましいが,従来,取り扱いのしやすさから,主として水溶性生体分子が標的とされてきた.生理的および薬理的な重要性を考えると,膜タンパク質に代表される脂好性生体分子への拡張



(図 2) 2017 年度第 1 回バイオ単分子研究会 1 日目の発表の様子

は重要である. 膜タンパク質は、機能に基づいて、主として、「受容体」、「酵素」、「膜輸送体」に分類でき、このうち膜輸送体に着目したマイクロチップ開発を渡邉先生らは進めている. 膜輸送体は、更に、「チャネル」と「トランスポーター」に分類される. 1 個あたり毎秒 1000 万個以上の標的分子を輸送できるチャネルに対してはパッチクランプ法により電気化学的に定量分析が行える. 一方、輸送速度が遅いトランスポーターに対しては、1 分子単位での機能分析はおろか、定量分析も困難であった. 生体膜を実装したマイクロチップの開発は、1998 年に発表されたヴェストファーレン・ヴィルヘルム大学の R. Peters らの研究に端を発する. 渡邉先生らが開発したフッ素樹脂の試験管とクロロホルムに溶解したリン脂質溶液を利用することにより、最小 200 アトリットルの容積の試験管に対しても、十分に薄膜化した生体膜を安定的に形成することが可能となった. これにより、計測限界が毎秒 2 分子で定量的に能動輸送が計測できる世界最高の感度を達成した.



(図3) 2017 年度第1回バイオ単分子研究会1日目の夕食の様子

2.1.2 スーパーカミオカンデの見学

スーパーカミオカンデは、岐阜県飛騨市神岡町にある、東京大学宇宙線研究所が運用する世界最大の水チェレンコフ宇宙素粒子観測装置である。ニュートリノの性質の解明、ニュートリノ天文学、大統一理論が予言する陽子崩壊の実験的検証という3つのテーマでの研究を行っている。前身のカミオカンデでは、小柴昌俊東大特別栄誉教

授が、超新星爆発で生じたニュートリノを世界で初めて検出したことで、ニュートリノ天文学を拓き、2002年にノーベル物理学賞を受賞した。スーパーカミオカンデでは、ニュートリノが質量を持つ証拠となるニュートリノ振動を観測した、素粒子の標準模型に修正を迫る成果により、東大の梶田隆章教授が2015年度にノーベル物理学賞を受賞した。



(図 4) スーパーカミオカンデ 実験区域の入口



(図 5) チェレンコフ光を捉える世界最大の 直径 50 cm の光電子増倍管

スーパーカミオカンデは個別の見学を受け付けていないが、研究会では許可を得て見学が実現した。見学には、入坑用の低公害マイクロバスとバス一台につき1名の保安員の手配が必要であった。第1日目の会場である富山市の呉羽ハイツを低公害バスで出発し、1時間ほどで神岡鉱業跡津坑口に到着した。坑口で一旦バスを降り、全員ヘルメットを着用して、保安員が同乗して再びバスに乗った。鉱山のトンネルを5分ほど進むとスーパーカミオカンデ実験区域の入口に到着した(図4)。前身のカミオカンデ時代からの伝統で、実験区域内の実験室の扉に、訪れた有名なゲストがメッセージやサインを残すそうで、取り外された歴代の扉が入口を入った付近に展示されていた。

スライドでの説明の後に、見学に移った.スーパーカミオカンデで有名な装置として、チェレンコフ光を捉える世界最大の直径 50 cm の光電子増倍管(浜松ホトニクス社製)がある(図 5).ニュートリノが水中の物質と相互作用し、荷電粒子を叩き出し、この荷電粒子が水中での光速を超えると、チェレンコフ光が円錐状に発生する.光を音波に置き換えてたとえると、チェレンコフ光は、超音速で飛翔する物体が発生する衝撃波に相当する.スーパーカミオカンデの光電子倍増管は1個30万円ほどで、合計



(図 6) スーパーカミオカンデの 実験水槽の蓋の上での見学



(図 7) スーパーカミオカンデの コントロールルーム

1万3千個設置されているとのことである. その後,実験水槽の蓋の上(図6)や,信号処理回路や高電圧電源が置かれたエレクトロニクスハットや,コントロールルーム(図7)を回り,およそ1時間の見学を終えた.

2.2 2017 年度第2回バイオ単分子研究会(2018年3月29日)

2017 年度第 2 回バイオ単分子研究会は、「バイオ単分子研究の近年の展開 一次期 (第 9 期) バイオ単分子研究会活動に向けて一」というテーマと副題で、研究会の委員のみが集まり、ATI で開催した.委員長の西野の独断で、次期のバイオ単分子研究会で扱いたいテーマとして、情報生命科学、クライオ電子顕微鏡、環境を選定し、それぞれ、小松崎民樹委員、宮澤淳夫委員、養王田正文委員に講演をお願いした.

1 人目の発表は、小松崎民樹委員が「一細胞ラマン計測と情報科学の高度融合による情報計測技術」という演題で行った。1 細胞ラマン分光イメージングは、細胞や生体組織を無標識で生きたまま観察することができ、かつ細胞内分子を網羅的に分析することができる有望な手法である。一方で、シグナル・ノイズ比が低いことが難点に挙げられる。ラマンスペクトル画像が張る高次元の特徴空間上に、スペクトル間測度(距離)を導入し、細胞の状態(癌/非癌、病変など)を判別することで、細胞病理診断の信頼性の質的向上を目指す研究を CREST のプロジェクトとして進めていることが発表された。

2人目の発表は、宮澤淳夫委員が「クライオ電子顕微鏡法による含水性試料の観察」という演題で行った。クライオ電子顕微鏡法は、これまで主に生体試料の観察に用いられてきたが、生物以外の含水性材料の観察にも有力であることが示された。また、近年、分解能性能を飛躍的に向上させているクライオ電子顕微鏡法による生体分子の立体構造解析法である単粒子解析法も紹介された。単粒子解析法では、結晶化が不要であることから、X線結晶構造解析よりも迅速に多くのタンパク質の立体構造を原子レベルに近い高分解能で解析できる。近い将来に X 線構造解析に比肩するとの予想もある。

3人目の発表は、養王田正文委員が「Hsp104/ClpBのタンパク質脱凝集機構とマラリア原虫での機能」という演題で行った。ATPのエネルギーを利用して、凝集したタンパク質をひも解き天然のフォールディング状態へと戻すことができる ClpB/Hsp104 に関する研究が示された。また、養王田先生は"from molecules to environment"をキャッチフレーズに研究を進めている。微生物を用いたバイオレメディエーション(生

物学的環境修復)の実例として,養 王田先生が進めている沖縄での土壌 浄化の試みなどが紹介された.

3 名の講演の後に、フリーディスカッションとして、次期バイオ単分子研究会活動に向けた議論を行った.



(図8) **2017** 年度第 **2** 回バイオ単分子研究会での 発表の様子

研究会の後の意見交換会においても、引き続き、次期バイオ単分子研究会活動に向けた議論を行い、バイオ単分子研究会の委員が中心メンバーとなり、科研費の新学術領域研究に申請する可能性も話し合われた.

2. 研究成果とトピックスなど

外部資金では、秋山委員が「統合的多階層アプローチによるシアノバクテリア生物時計システムの新展開」という課題で科研費基盤研究(S)に採択された。研究成果では、須藤委員の分子進化的にユニークで極めて熱に安定なロドプシンに関する研究(Scientific Reports)、佐々木委員の凝集化するタンパク質1分子の励起運動の観察(Scientific Reports)、養王田委員のトリクロロエチレンを還元的に脱塩素化してエテンにする細菌コンソーシアムの研究(Scientific Reports)などがあった。

研究会開催記録

【第1回】2017年9月12日(月)-13日(火) 富山県富山市、スーパーカミオカンデテーマ: 「タンパク質の作動原理の理解へ向けて - 機能する姿を活写する -」9月12日(月) 呉羽ハイツ

- 1. 「NMR を使ったタンパク質の in situ 解析の最近の動向」 板尾 豪人 (京都大学)
- 2. 「高速原子間力顕微鏡による生体分子のダイナミクス計測」 内橋 貴之 (名古屋大学大学院理学研究科)
- 3. 「量子センサーによる一分子計測」 五十嵐 龍治 (京都大学大学院工学研究科)
- 4. 「マイクロチップを利用した膜タンパク質の単分子計測」 渡邉 力也 (東京大学大学院工学系研究科)

9月13日(火)

スーパーカミオカンデ (岐阜県飛騨市) 見学

【第2回】2017年3月29日(木) 御茶ノ水

テーマ: 「バイオ単分子研究の近年の展開

- 一 次期 (第9期) バイオ単分子研究会活動に向けて 一」
- 1. 「一細胞ラマン計測と情報科学の高度融合による情報計測技術」 小松崎 民樹 (北海道大学)
- 2. 「クライオ電子顕微鏡法による含水性試料の観察」 宮澤 淳夫 (兵庫県立大学)
- 3. 「Hsp104/ClpB のタンパク質脱凝集機構とマラリア原虫での機能」 養王田 正文 (東京農工大学)
- 4. フリーディスカッション 「次期(第9期)バイオ単分子研究会活動に向けて」

バイオ単分子研究会員名簿

西野 吉則	北海道大学 電子科学研究所光科学研究部門 コヒーレント光研究分野	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物質系専攻	教授
井出 徹	岡山大学 自然科学研究科化学生命工学専攻	教授
大島 泰郎	共和化工㈱ 環境微生物学研究所	顧問
飯野 亮太	自然科学研究機構 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 バイオ・ソフトマテリアルグループ	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細胞構造学講座	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
杤尾 豪人	京都大学 大学院理学研究科生物科学専攻	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 理学部生物分子科学科	教授
養王田 正文	東京農工大学 大学院工学府生命工学専攻	教授

2018年3月現在

界面ナノ科学研究会(第8期)の総括

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としての二期目(計六年間)を終え、委員長としての私の任務はついに終了した。肩の荷が下りたと感じるとともにさみしさがある。

本研究会は ATI のルーツの一つである、走査トンネル顕微鏡の開発に端を発した研究会がこれまで発展してきて、2012 年に界面ナノ科学研究会に衣替えした。これには、森田清三先生の、「走査プローブ顕微鏡(SPM)を応用した材料開発を前面に出した研究会に移行する」という思いがある。それに呼応して本研究会は SPM ユーザー・開発者だけではなく、材料合成、理論家、デバイス開発者などの幅広いメンバーを集



(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。

めて活動し、二期六年間の研究会活動が 2017 年度に終了した。次の委員長は柴田直哉 (東京大学)さんである。透過電子顕微鏡を用いた著名な研究者であり、彼のもとで本研究会のさらなる発展を祈念している。

この六年間にわたる ATI の支援に対して、いくら感謝を述べても述べきれない。自石貞純さん、色野美和子さん、高瀬正江さん、佐藤由紀さん、石田隆康さん、久良木博史さん、守屋宏一さん、青木郁さんらの事務面からの支援、森田清三先生、新庄輝也先生の研究会運営に対する支援、そして伊達宗行先生の大所高所からのご意見と支援に心よりお礼を述べたい。そして、お忙しい中、議論に加わっていただいた研究会メンバーの先生方にも最大限のお礼を述べたい。研究会では私自身も深く考えさせられ、多くのことを学ぶことができた。研究会への参加者が何か一つでも「気づき」があったならば本望である。そして、本研究会の最大の特徴である「40 分講演、80 分質疑」というスタイルが、相互の理解において貢献があったと信じたい。講演する側も、意外な質問やずいぶんと深掘りをした質問、そして、科学観や研究者キャリアに関する質問など、様々な質問について答える際に何か一つでも学ぶことがあり、それがいますぐではなくてもサイエンスの進歩に役に立つなら大きな喜びである。

2. 運営の方針と成果

界面ナノ科学研究会では幅広い分野の研究者を集め、無機固体物質を軸として、それが気体、液体、固体と形成する界面について、学理の構築に力を注いできた(図 1)。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、構造・物性評価法、物性発現理論までカバーする。以下、研究会の特徴を列記する。

- 1. ATI が掲げる研究会の目的は、「専門領域を超えた研究人材による科学技術研究 分野研究領域の融合を推進し、新しい研究コンセプトの提案を目指す」である。 そこで、本研究会では、「人と人の出会いこそが界面である」という考え方を重視 し、研究会での人の交流を心がけた。そのため、幅広い分野から委員を求めた。 本研究会メンバー(総勢 15 名)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、異分野融合と言える。
- 2. その分、研究対象分野は幅広くなってしまう。そこで、軸足を無機物に固定した。
- 3. 「脳が汗をかく」研究会を目指した。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を開催している。
- 4. 委員には個性的なキャラクターを有する方を選んだ。「言うべきことは言う。疑問があったら口に出す」ことが科学の健全な発展を促すという考えのもと、自らの意見をしっかりと言う気鋭の若手研究者をメンバーに迎えた。実際、メンバーの皆さんはリーダーとして、新学術領域研究の代表やWPI 拠点長等として活躍している。
- 5. 助教レベルの若手研究者との交流も重視した。ATI 研究助成の採択者を 2、3 名呼 び、講演していただいた。その後の懇親会も含めて、 交流を重視した。

異なる専門分野を持つ研究者同士の交流と多岐に渡る議論により、多くの最新知および考え方が共有され、参加研究者は様々な発想や刺激を得たものと信じる。

3. 2017 年度の研究活動の概要

六年間の締めくくりであるので、思い切ってこれまでとは異なるスタイルの研究会を開催することにした。それはメンバー間での将来的な研究交流に向けてお互いの理解を深めること、そして、<u>常に移り変わる研究環境や研究動向に応じて「研究者自身が臨機応変に対応する」</u>ことが可能になるよう、様々な考え方を議論することとした。

第一回研究会 2017年10月11日@御茶ノ水

将来的な共同研究への発展を期待し、各メンバーから各自の最新研究や動向についてお話しいただいた。話は今後の科学の潮流、科学研究のあるべき姿、研究の進め方から WPI 採択ストーリーまで多岐にわたり、意見交換と議論で花が咲いた。このざっくばらんな雰囲気、そして、それぞれのトピックに対してメンバー全員が高い集中力で脳が汗をかくほど議論するということが、界面ナノ科学研究会の良いところである。

第二回研究会 2018年1月10-11日@熱海

熱海の温泉宿にて一泊で開催された。初日は、各メンバーが感じている問題意識について議論した。教育、研究、科学技術行政、大学運営と、日頃感じていることを生々

しく話していただいた。皆さん、葛藤と闘い ながら教育・研究を行っているのだと改めて 実感し、私自身もしっかりしなければと思い 直す機会になった。いくつか話題を紹介する。

- ・研究における Creativity の出し方
- ・博士課程の学生数を増加させる方法
- ・小学生時代からの教育のあり方
- ・画一性を求める日本式教育の限界
- ・研究方針や研究計画の決定に際しての 外的圧力の功罪
- 外国人研究者数増加の方策
- ・大学の社会貢献とは
- ・最近の学生さんの気質と対応法など
- ・ベル研での雰囲気



研究会終了後、熱海梅園を散策した。少し 時期が早かったため満開とまでいかなか ったが、早咲きの梅花の香りを堪能した。

現在、日本の教育・研究界が抱える課題が噴出した感があった。これらに対して解決策を探り、着実な一手を打たねばならない。そのためにも問題自身を認識し、声を上げ、施策に落とし込むような活動が必要である。

今回のように、日本の科学研究や大学のあり方についてまとまった人数で議論でき、大変有意義であったと私自身は感じた。もう少し焦点を絞って、今後のナノテク・材料研究の長期的展望(たとえば、JST の CRDS が主宰する俯瞰会議やワークショップなど)や、所属する大学の5-10年程度のスパンでの展望について議論する機会はあるが、ざっくばらんに日本の教育と科学研究について多くの方と同時に意見交換する機会はなく、非常に貴重な機会であった。

二日目はサイエンティフィックなセッションとして、ATI 研究助成採択者をお呼びして最先端の研究について講演していただいた。新しいタイプのインダクタの開発(「非線形伝導を利用したインダクタ開発とその微細化に向けて」田辺賢士さん(名古屋大学))、及び新薄膜合成手法(「IV 族半導体薄膜の"層交換"とカーボン材料への応用」都甲薫さん(筑波大学))について報告がなされ、活発な質疑応答が展開された。

4. 界面ナノ科学を取り巻く環境

界面ナノ科学を取り巻く研究環境の変化について、過去の研究報告書でも論じてた。 昨年度のATIニュース第23号(2017年10月)や表面科学38(2017)494にも掲載されている。本稿でも引き続き研究環境の変化を考え、この後いくつか提言を行いたい。

現状認識 研究力=研究量×質:研究量低下を回避不能として受け入れる

日本の研究力低下についての記事を頻繁に目にする。データを見る限り、論文総数、そして、影響力が大きい高被引用論文数の低下は明白である。

確実に、論文数の低下はさらに進む。

そう考える理由は多数ある。最も大きい要素が、研究者の1)高年齢化、2)ポスト数削減、3)研究に割ける時間の低下である(参考:文部科学省科学技術・学術審議会人材委員会・中央教育審議会大学分科会大学院部会合同部会(第1回) 配付資料【資料2-1-2】研究人材の育成・確保を巡る現状と課題)。我が国では、この三つのことが同時に起きている。したがって、論文数の低下、つまり研究量の低下は避けられず、それを論点にするのはもはや意味が無いと考えている。すると、質の向上を軸とした議論と施策の実行をすべきとなる。

上記の三つの要素について「大学における研究」という観点で話を進めたい。残念ながら私自身の思考が浅く、定量的な議論はできていない。以下は「感想文」である。

まず、研究者の 1) 高年齢化は定年の延長によって引き起こされたと考えられる。これにより日本全体の研究者の平均年齢が上がるとともに、新陳代謝のサイクルが長くなってしまった。この 10 年で起きた特異的なことは、定年退職者数が減りポストが空かないため、教授適齢期の准教授は歳だけを重ねていったことである。そして定年退職によってポストが空いたとしても、運営費交付金が減額されたことにより、2) 空き教授ポストを埋めないことも起きた。いざ教授公募となると、歳を重ねた准教授は年下の准教授と争わねばならず、多くの准教授が昇任できなかった。その結果、准教授ポストが空かねば助教も昇任できない、そして、助教ポストが空かねばポスドクも昇任できない、という連鎖が起きている。このような過程で研究者の高年齢化が進み、チャレンジ性にあふれる若手研究者がより上位ポストで活躍する場が減ってしまった。それと同時に、若手のみが対象の研究費(科研費・若手 S、若手 A、NEDO 産業技術研究助成等)が打ち切られ、極めて憂慮すべき事態だと考えている(このような状況であるので、ATI 研究助成は非常に意義がある事業である)。

そして、3) 研究者が研究に割ける時間が減少した。ポスト数削減は着実に教員負担を増す。大学として実施しなければならない仕事は減らないのであるから、少ない人数で仕事を負担せねばならない。すると、クリエイティビティを発揮できる時間が減少するのは明らかである。さらに、アウトリーチ、プレスリリースの重要性が増し、きめ細やかな対応が求められていること、入学試験の多様化と厳格化への対応、学生のメンタルケアと卒業に向けた指導(昔は留年しても自己責任だった気がするが、、、、)が手厚くなっていること等、大学教員は益々忙しくなっている。

これに社会全体を覆う風潮が重なってくる。特に検討を要するのが、働き方改革という言葉で代表される、労働時間短縮と高負荷回避の動きである。さらに安全性確保の観点から、学生が研究室に滞在する時間は減少し、最小限の時間で最大の成果を出すことが望まれている。教員が不在の夜中に学生同士であーでもないこうでもないと実験を進め、腹が減ったらラーメン屋に繰り出すという風潮は失われつつある。「だらだらするくらいなら帰宅を指導する」という時代である。さらに、インターンシップや海外留学等の推奨により、学生が研究に割ける時間も減少している。そのような「日本の空気」の中、大学研究者は学生らとともに世界の研究者に伍していくことが望まれている。

以上、すべて研究量の低下につながる。これらを考えると、「単に研究費を増やした ら成果が出る」という状況ではないことは確かである。学生を惹きつける魅力的なテーマを提示し、短時間で成果を挙げる時代である。益々研究者の能力が問われている。

5. 提言

今や日本には金が無い。従って金をかけずに、生産性の向上を図らねばならない。

マネジメント技術の重要性

研究費の大幅な増加も期待できず、仕事も増える、ということなら、研究や仕事をマネジメントするスキルを磨き、極力効率的に時間を使い、<u>戦略的に行動する</u>ことが重要である。したがって、研究マネジメントの重要性が益々重要になっている。リーダーのマネジメント技術にプロジェクトの成果が強く依存することついて異論はないだろう。

特に大学教員にとっては様々な階層、つまり、研究室内レベル、複数の研究室をまたぐ、あるいは、特許まで考えたマネジメントと、多様なマネジメントスキルが要求される。また、学内運営業務としては学科レベル、学部レベル、大学レベルと異なるスキルが必要とされる。

しかし、大学教員は研究マネジメントのマの字も体系的に学んだことがなく、試行 <u>錯誤で進めている</u>のが実情である。そこで、企業で行っているようなマネジメント研修を導入し、スキルを磨くことが考えられる。その際特に、「研究開発マーケティング」 が重要だと思っている。これは私の持論で、マーケティングの考え方やフレームワー クがそのまま研究に展開することができると考えている。

「忙しいから時間の無駄」と思われるかもしれないが、その研修2時間でその後多くの研究を効率化できるのであれば、効率が高い、時間の投資となる。もちろん、これは全研究者でなくても良い。たとえば、若手登竜門と目される研究助成を受けた研究者のみを対象とし、その報告会等で集まる機会に研修を行えば負担が少ないだろう。

講師としては、マネジメント技術のプロの講師に加え、引退した研究室主宰者も考えられる。「ある特定の研究室から人材が輩出する」ことがよく起きる。その研究室には、「他の研究室にはない何か」があるはずである。その研究室の主宰者に研究室運営の秘訣を語っていただければ、聴講者の研究室運営スキルが向上し、研究成果の最大化と人材輩出につながることが期待できる。

風通しの良い研究コミュニティの実現:科学にも「ノーサイドの精神」を

よりプロダクティブになるには、良い研究者コミュニティが欠かせない。良いコミュニティは、「若手でも良い人材は引き上げ、かつ、若手でも言いたいことが言える」という風通しの良さを持っていることだろう。

「ノーサイド」という言葉をご存じだろうか。ラグビーでは試合中に敵味方に分かれてルールの範囲内で体をぶつけ合う。しかし、試合が終われば敵味方なく、サイドがない、つまり「ノーサイド」である。ラグビーではこの考え方が浸透しており、勝負のためにいかに激しく体をぶつけ合ったとしても、試合後にはアフターファンクシ

ョンと呼ばれる交歓会が開催され、両者の健闘を称えあい、交流を深める。つまり、 試合中だけライバル心を露わにし、体を張って勝負するのである。科学コミュニティ もこうありたい。研究会などでは、明快な意見を述べ、サイエンティフィックな議論 をたたかい合わせる。しかし、その研究会が終われば、カラリとお互いを称えあう。 つまり、裏でこそこそということはなく、正々堂々と公の場で議論する。

そのような風通しの良いコミュニティが科学の発展には必要だと考える。そして、 年功序列的要素を極力排し、有能な若手を惜しげなくサポートする文化を尊ぶべきで ある。つまり、科学における民主主義の確立が重要である。

チャレンジ精神の応援: アンダーザテーブル

日本企業では「アンダーザテーブル」という言葉がよく使われていた気がするが、 最近ではすっかり聞かなくなった。Googleでは"20 percent time"と呼び、「業務時間の20%を個人の自由な発想に基づいた研究に使って良い」というものである。このシステムの大学への導入を提言したい。

大学でこのような「アンダーザテーブル」を推奨しなければならないとは、非常に 嘆かわしいことである。私は以前企業に勤めていた。しかし、もっと自由に研究テー マを選択したいと思って大学に移ってきた。大学で行う研究において、最大の価値は、 「自由」であると信じている。

ところが昨今の大学はどうだろうか。今、その自由は徐々に失われている。様々な目標に沿ったプロジェクトが多く、厳しい成果管理が課され、自由な研究展開が許されるプロジェクトは減少している。現在、自由な発想で展開できる大型予算は、科研費と IST の一部の事業のみである。

社会に役立つ、目標に沿った研究を行うのは当然として、<u>途中で興味ある予想外の</u> <u>実験結果が出てきたら、その深掘りを展開して良い</u>ということにしてはどうだろう。 期日までに所定の成果を出すことだけが優れた研究ではなく、研究途中で見つけた種 について、興味深い種であることをいち早く見抜き、独創性ある研究に展開すること も優れた研究である。

つまり、アンダーザテーブルの成果もそのプロジェクトの成果として評価してはどうだろうか。見つけた種が、本当にその興味深いのかを見抜く目こそ大切にすべきではないだろうか。

自由な発想に基づく研究を自発的に行う空気を醸成しなければならない。

様々な提言が考えられるが、結局、最後は財務省の意向をも考えなければならない。 それについては非常に興味深い記事があるので、下記で紹介して本報告を終えたい。 「国立大学は納税者への義務を果たせ (財務省主計局次長)」

http://kyoiku.yomiuri.co.jp/torikumi/jitsuryoku/iken/contents/44.phpこの記事については、研究報告会でコメントを述べる予定である。

以上、勝手なことを述べてきた。そのような機会を与えていただき、ATI に心よりお礼申し上げたい。

研究会開催記録

【第1回】2017年10月11日(水) 御茶ノ水

- 1. 一杉 太郎 (東京工業大学)
- 2. 柴田 直哉 (東京大学)
- 3. 福間 剛士 (金沢大学)
- 4. 合田 義弘 (東京工業大学)
- 5. 陰山洋 (京都大学)
- 6. 高橋 琢二 (東京大学)
- 7. 安藤 康伸 (産業技術総合研究所)
- 8. 森田 清三 (大阪大学)
- 9. コメンテータ

新庄 輝也 (京都大学)

加藤 大地 (京都大学)

【第2回】2018年1月10日(水)-11日(木) 静岡県熱海市

1月10日(水)

「研究会員による講演」

- 1. 一杉 太郎 (東京工業大学)
- 2. 陰山洋 (京都大学)
- 3. 大友 明 (東京工業大学)
- 4. 千葉 大地 (東京大学)
- 5. 高橋 琢二 (東京大学)
- 6. 合田 義弘 (東京工業大学)
- 7. 福間 剛士 (金沢大学)
- 8. 柴田 直哉 (東京大学)
- 9. 戸川 欣彦 (大阪府立大学)

1月11日(木)

「研究助成採択者による講演」

- 1. 「非線形伝導を利用したインダクタ開発とその微細化に向けて」 田辺 賢士 名古屋大学 大学院理学研究科物質理学専攻(2017年度)
- 2. 「IV 族半導体薄膜の"層交換"とカーボン材料への応用」 都甲 薫 筑波大学 数理物質系 物理工学域(2017年度)

界面ナノ科学研究会員名簿

一杉 太郎	東京工業大学 物質理工学院応用化学専攻	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学際研究センター	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	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 機能材料コンピュテーショナルデザイン研究センター	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 新学術創成研究機構ナノ生命科学研究所	所長·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

2018年3月現在

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