

こうして無事、分子研での生活が始まり分子制御レーザー開発研究センター技術職員として配置された。センターの中心業務でもある研究室支援として当時発足したばかりの大森研究グループでお世話になり、時同じくして着任した香月助教と共に研究室立ち上げを開始した。大学ではお目にかかれなような広いその実験室を前に何から手をつけようか考えていた矢先に奴等は現れた。実験室は1階ということもありムカデや足の長い蚊、毛虫などの侵入を容易に許し研究環境を脅かす存在となっていた。あの手この手を繰り出してくる虫たちの侵入経路の分析から始まりルートの寸断を施したのが最初の仕事であった。幸運なことは、この作業を通して大森教授と香月助教の虫相手でも揺るがない卓越した洞察力や推理力を認識することができたこ

とであろうか。その後も冷却水の配管工事や電気工事、装置の組み立てなど、夏前にはようやくデータも出始めた。夏には新手の虫の侵入を許したが長くなるのでやめておく。

大森研究グループでは毎週ミーティングが行われているが、これにも参加させて頂いた。問題点や研究計画について綿密に理路整然と議論される。また研究室に外国人がいるときにはすべて英語で行われ、そこには学生もスタッフも外国人も分け隔てない議論が展開され、その攻撃と防御のバランスは見事であった。

今となってみればこのような人の出入りが多い環境も「分子研ならでは」であり、その都度開催される歓迎会やチームワークが見事なUVSOR BBQ、ゲリラ的に発生する飲み会などを通して国内外の多くの研究者と話す機会をもてたことも何よりの経験であった。

今こうして故郷の岩手大学で仕事をする中で分子研や東北大で勉強したことが大きく役立っている。特に「理論的な思考と展開」は大森グループでのミーティングはもちろん、分子研で多くの研究者と話し、グラスを傾けながら徹底的に行われる議論の中で叩き込まれたと実感することも多い。離れてみて感じる分子研の魅力。一言で表現するのは困難ではあるが「自由な研究環境と強固な研究地盤」であろうか。分子研30年余の歴史、ここ岡崎から羽ばたき世界中で多くの研究者が活躍している。私も技術職員として「分子研」という誇り高き重い看板を背負い、その看板に恥じぬよう今後の職務を全うしていきたいと思っている。最後に中村所長をはじめ大森グループの皆様、分子研でお世話になったすべての皆様に心から感謝いたします。



外国人研究職員の紹介

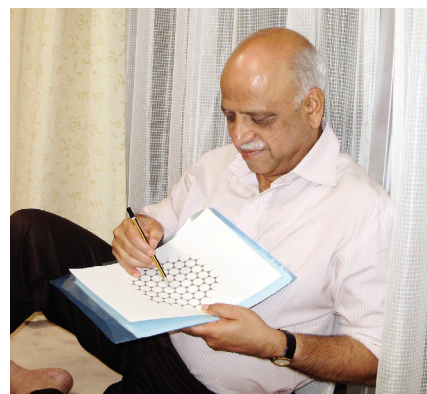
Prof. GADRE Shridhar Ramchandra

from India

平成21年5月18日から三ヶ月間滞在されるGadre教授は、1950年にインドで生まれ、1978年にPune大学(インド)で学位を修得され、1988年からPune大学化学科の教授をされているインドの量子化学分野の代表的な研究者です。Gadre教授は、INSA-JSPS交換プログラムで1986年8月から1987年2月まで京都大学に滞在されました。2007年には、名古屋大学、京都大学、東京大学、東北大学で講演のために来日されました。また、分子研で開催したAsian-Pacific Conference on theoretical and Computational Chemistry (2005年)とICQC Satellite Symposium

on Calculations of Large molecules (2006年)には招待講演者として来られました。今回の分子研の滞在に際しては、奥様とお嬢さんを同伴されて日本の図書館にしばしば行かれて、日本の文化を学ばれています。3人ともベジタリアンなので、食事にはすこし苦勞をなされているようです。

分子研での研究課題は、「巨大分子の量子化学計算法の開発」です。現在、量子化学計算法は数十原子からなる分子を非常に精度高く取り扱えるが、ナノサイズの分子の取り扱いには飛躍的な進展が望まれています。密度汎関数理論法は相応に大きな分子の大規模計算を可能にし



ている。しかし、一般に広くも用いられている密度汎関数は、ナノ分子系で主題となる超分子、ゲスト-ホスト相互作用、分子認識、自己集合、生理活性、タンパク質の立体構造などで本質的な役割をす

る非共有結合相互作用などを取り扱うことができないという致命的な欠点がある。

このために、大きな分子の重要な部分だけを量子化学計算してそれ以外を古典的な分子力場計算や低いレベルの量子化学計算で近似するQM/MM法やONIOM法、分子をフラグメントに分割化して

計算するFMO (Fragment Molecular Orbital) 法やDC (Divide-and-Conquer) 法が開発されてきている。これに対して、Gadre教授は独自にMTA (Molecular Tailoring Approach) 法と呼ばれる方法を早くから展開してきています。この方法に、我々が開発している二次の

Møller-Plesset摂動法 (MP2, SCS-MP2, RI-MP2) の高速並列計算アルゴリズムを取り込むことにより、ナノサイズ分子においても極めて精度の高い計算が実現できるので、ナノサイエンス分野の計算ターゲットを格段に広げることが期待されます。(永瀬 茂 記)

Prof. DAS Sankar Prasad from India



Das教授は液体の非平衡統計力学の分野、特に、ガラス転移の分野でインドにおける第一人者である。以前、客員で滞在されていたBong-Soo Kim教授と同様にシカゴ大学のMazenko教授の下で学位を取得され、Kim教授の数年先輩にあたり、わが国の非平衡統計力学の重鎮である川崎恭治先生の共同研究者でもある。

現在、量子化学の分野では密度汎関数

理論が花盛りであるが、その起源は古典液体の統計力学(平衡論)で発達した密度汎関数理論にある。その特徴は系の自由エネルギーを粒子密度の汎関数として表現することにあるが、この理論を非平衡領域に拡張したものが京都大学の宗像氏によって提案された「動的密度汎関数理論」である。この理論の密度汎関数は系が平衡に達したときにボルツマン分布を満足するように工夫されている。しかし、この汎関数の変数は「配位空間」における密度(すなわち粒子の位置)のみに関係しており、運動量空間の方は陽には考慮されていない、この密度汎関数を

運動量を含む「位相空間」の「密度」を含む形に一般化したのがDas教授である。この理論は波数 $\rightarrow 0$ 、振動数 $\rightarrow 0$ の極限において自然に流体力学の方程式に移行し、また、平衡条件においてボルツマン分布を満足する。

Das教授はこれまでもっぱら理論物理の分野で非平衡統計力学の基礎論と遅いダイナミクスの理論に携わってこられてが、分子研では平田グループとの共同で、彼の理論を化学の問題、特に、溶液中の蛋白質の構造ダイナミクスに拡張することを目指しておられる。

(平田文男 記)

Prof. CHATTERJEE Bishnu Pada from India



2009年5月から約3ヶ月間、ウエストベンガル工科大学の名誉教授である

B. P. Chatterjee博士が、岡崎統合バイオサイエンスセンター生命分子研究部門に滞在されています。博士は1973年にカルカッタ大学にて学位を取得後、以来長年にわたって植物レクチンの研究に携わってこられました。レクチンとは、糖鎖を認識するタンパク質の総称です。博士はこれまでに、様々なレクチンを植物や菌類から単離・精製しております。さらにその構造決定や糖鎖の認識特異性の解明など幅広く研究を展開され、糖鎖生物学の進展に大きく貢献されてきました。また近年では、これらの植物レクチンを病気の診断や免疫治療に役立てる研究を推進するな

ど、インドの糖鎖バイオテクノロジーの第一線で活躍されるとともに、2003年から2006年にかけてインド科学会議連合の事務局長を務め、インド科学会の重鎮としても活躍されています。

今回、分子研に滞在する機会を得て、自らの研究をより分子レベルの研究へと展開することができることを大変喜ばれています。例えば、糖鎖に着目した肝硬変バイオマーカーの探索研究をさらに発展させるため、私たちのグループで開発してきたHPLCマップ法を用いた糖鎖の詳細な構造解析を行っています。これまではレクチンの認識特異性によって、対象となる糖鎖の大まかな構造情報が得

られるのみでしたが、今回の研究によって未知の糖鎖の詳細な構造を知ることが可能となり、より効率的にバイオマーカーの探索を行うことができるものと期待されます。また博士は新たに、フロントアルフィニティークロマトグラフィー (FAC) 法を用いたレクチンの基質認識特異性および親和性の定量的評価にも取

り組んでおられます。FAC法は、酵素、レクチンなどの生体分子と基質アナログ、オリゴ糖鎖間の親和力を精度高く決定できる方法です。

先日、分子研滞在中に博士が誕生日を迎えられ、研究室メンバーでささやかなパーティを開きました。68歳 (!) になられてますます旺盛な探求欲と、

なにより心から楽しんで研究に取り組む姿に、研究室一同大いに感銘を受けています。今回の共同研究を通じ、生物学および分子科学的アプローチによる魅力的な成果を挙げられることはもちろん、これをきっかけとして、インドと日本の科学交流が一層深まることを期待しています。(加藤晃一 記)

Prof. Moshe Shapiro

from Canada



Shapiro教授は物理化学分野を代表する理論家であり、現在British Columbia大学化学科および物理学科のCanada Research Professorを務めておられます。この度、2009年10月より3ヶ月間、分子科学研究所の外国人客員教授として滞在されることになりました。Shapiro教授は1980年代半ばに、世界に先駆けてコヒーレント制御の概念を提唱したことで知られています。コヒーレント制御とは物質の波動関数を光で制御する技術であり、同教授は分子の光解離をモデルにこの概念の有効性を理論計算によって実証されました。その後コヒーレント制御は、レーザー光源の進歩に伴い実験的にも実現され、現在では物理化学分野だけでなく、固体物理や生命科学、あるいは情報科学など様々な研究分野を横断する普遍的概念として益々その存在感を増しています。

Shapiro教授は1944年にイスラエル

のエルサレムでお生まれになりました。1965年にヘブライ大学の生化学科を卒業された後、引き続き同大学大学院の物理化学コースに進学されR.D.Levine教授の下で研鑽を積まれ、1970年に理論化学の博士号を取得されました。1970年から1972年にかけてHarvard大学化学科のM. Karplus教授の下で博士研究員を務められた後に、Weizmann研究所の化学物理学科の研究員としてイスラエルに戻られ、1974年に上級研究員、1977年に准教授、1983年に教授に昇進されました。2002年に現職に就かれ、現在に至っております。その間、1992年から2002年にかけて、Toronto大学化学科の教授を兼任された他、Weizmann研究所科学評議会の副議長、化学物理学科主任等の要職や、Oxford大学、Columbia大学、California大学Berkely校を始め様々な大学の客員教授やHarvard大学天文物理センターITAMPの上級フェローなどを歴任されました。またこれまでに、The Landau Prize, Alexander von Humbolt Research Award, The Kosloff Prize, The Weizmann Prize, The Israel Chemical Society Award, The Willis E. Lamb Medal, IOP Fellow, APS Fellow等の栄誉を受けられました。また、Israel Journal of Chemistry, Molecular Physics, Chemical Physics, Annual

Review of Physical Chemistry, Journal of Physics B, European Journal of Physics Dなどの雑誌の編集委員を務めておられます。

筆者はここ数年来Shapiro教授と公私を含めおつき合いさせていただいておりますが、同教授の科学的な洞察力と頭の回転の速さには常々驚かされております。また、科学に対する厳しい姿勢には見習うべき点が多く、プロフェッショナルとしての在り方を学ぶ絶好の教科書でもあります。一方、国際的な舞台では、筆者のような若手を常に暖かくサポートしてくれる、頼りがいのある先輩でもあります。私生活では、4人のお子さんを育て上げられた子煩悩の家庭人でもありますし、空手やバスケットボールをこよなく愛するスポーツマンでもあります。

Shapiro教授は現在も、コヒーレント制御をベースにした斬新な物質制御の手法を次々と提唱されており、その対象もレーザー冷却原子からカーボンナノチューブまで多岐にわたっています。今回ホスト役となる分子研大森グループは、コヒーレント制御の実験研究で世界をリードする立場にあり、理論面と実験面の双方での世界トップレベルの研究チームの共同作業によって、光分子科学の新たな局面が切り開かれることが期待されます。

(大森賢治 記)