

領域略称名：高次系分子科学
領域番号：477

平成24年度科学研究費補助金
「特定領域研究」に係る研究成果等の報告書

「分子高次系機能解明のための分子科学—先端計測法の
開拓による素過程的理解」

(領域設定期間)
平成19年度～平成23年度

平成24年6月

領域代表者 東京工業大学・資源化学研究所・教授・藤井 正明

目次

1.	研究領域の目的及び概要	1
2.	研究領域の設定目的の達成度	2
3.	研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	4
4.	主な研究成果	5
5.	研究成果のとりまとめの状況	12
6.	研究成果の公表の状況	
	(1) 主な論文等	
	成果リスト	15
	新聞発表	26
	学術誌の表紙に掲載された論文	29
	その他特記事項	30
	受賞	33
	(2) ホームページについて	36
	(3) 公開発表について	39
	(4) 「国民と科学・技術対話」について	43
7.	研究組織と各研究項目の連携状況	44
8.	研究費の使用状況	50
9.	当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	51
10.	研究計画に参画した若手研究者の状況	52
11.	総括班評価者による評価の状況	54

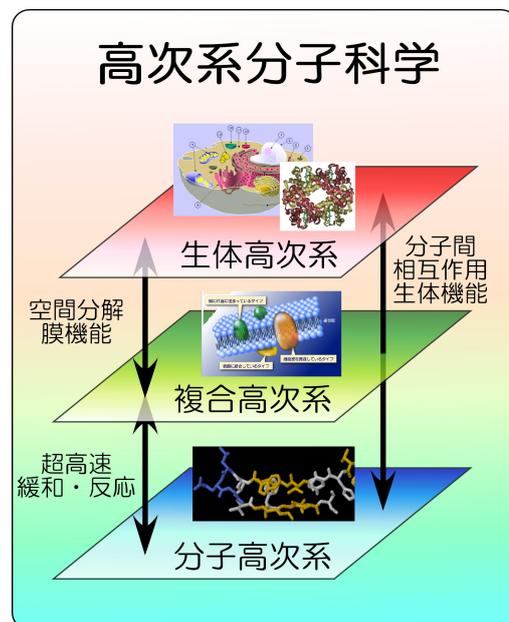
1. 研究領域の目的及び概要

20 世紀の分子科学は単純化、理想化、精密化の研究の時代であり、分子線中のクラスター構造とダイナミクスの研究、フェムト秒を切る勢いで発展している超高速レーザーとそれを用いた分光、さらに生体分子に対する共鳴ラマン分光など、様々な方法が開発され、分子科学の基本分野において素過程的理解は極めて深まってきた。一方、生体機能に代表されるような実在分子高次系における分子の働きは複数の過程により実現され、協調的に連動することで極めて効率よく精緻に機能している。この精緻な協調的連動を素過程に分解して理解することは、21 世紀の分子科学に課せられた大きな命題であり、生命科学、材料科学、ナノサイエンス、など様々な実在分子高次系に対する科学的基盤を提供する。

そこで、本領域「高次系分子科学（略称）」では分子科学とその関連分野で発達した計測技術と素過程的理解を融合し、**新たな先端的計測方法論を創出しつつ実在分子高次系の分子論的理解**を目指す。気相クラスター、凝縮相、生体分子研究など、従来は個別に発展してきた領域の研究者が**分野の垣根を超えて緊密に連携**することにより分子科学に新しい潮流をつくり、高次複合性に対する分子論的理解を目指す。本特定領域で創出される新たな研究手法は、これら高次な分子相互作用で成り立つ現象を理解するツールとして、化学のみならず生命からナノ・材料まで広い領域の学術研究に対して貢献することが期待される。

領域は分子高次系（A01）、複合高次系（A02）、生体高次系（A03）の3班により構成する。分子高次系班（A01）は、分子クラスターなど抽出された分子システムでの分子の協調的連動の理解を目指すグループである。複合高次系班（A02）は、超高速分光、非線形分光、プローブ顕微鏡を駆使して分子集合体や界面の機能の研究を行うグループである。生体高次系班（A03）は、独自の分光学的方法を駆使して生体分子の分子科学的研究を行ってきたグループである。これら3班の連携・共同研究により高次系分子科学を創出する。

本特定領域研究申請の特色は、クラスター、凝縮相、生体分子のフィールドで優れた独創的計測手法を開発してきた研究者が連携して、高次系分子科学の研究を展開するところにある。総括班はこれらの共同研究を促進する役目を担い、高次系分子科学の問題に取り組むことによって、各自が得意とする測定手法をさらに高めつつ（班内共同研究）、他の班とも連携することによって新方法論の開拓を促進し（班間共同研究）、高次系分子科学という新たな研究領域を創出する。



2. 研究領域の設定目的の達成度

領域全体の目的：全て十分に達成

- ・ 新たな先端的計測方法論の創出：達成、下記 A01 (3) (4), A02 (1) (4), A03 (1) を参照
- ・ 実在分子高次系の分子論的理解：達成、下記 A01 (1) (2), A02 (2) (3), A03 (2) (3) を参照
- ・ 分野の垣根を超えて緊密に連携：達成、140 件の共同研究企画、51 報の共著論文、53 件の報告書

A01 班は気相から生体分子へのアプローチに成功し、凝集相、生体分子研究と連動できる基礎手法を作り上げた。A02 班は凝縮相基本分子から界面、人工的膜タンパクモデル系を縦断する研究を行い、分子に於ける運動性の階層性に切り込んだ。A03 班は新規計測手法の開発と A01, A02 班に連携する分子連動の基礎過程解明に基づきタンパク質の運動性機構の解明に向けて研究を推進した。これらは下記に示す個々の設定目標の達成に止まらず、高次機能分子に対して気相、凝集相、生体分子研究者の広範囲な共同研究を可能とし、領域を超えた新たな分子科学の端緒として国内外の関係学術領域に大きなインパクトを与えた。従って、領域の設定目的を十分に達成した。以下、個別の研究項目における設定目標の達成内容を示す。

A01 分子高次系：全て達成

- (1) 孤立系における高次分子系の構造とダイナミクスの観測と理解：達成
塩基ヌクレオチドや5残基ペプチドなどの生体分子との観測と構造決定に成功した（三枝、藤井正）。また、ペプチド・水モデルクラスターにおける水分子の転移を観測し、そのダイナミクスの解明に成功した（関谷・藤井正）。
- (2) 実在系と孤立系を結ぶ高次分子系の観測と構造・機能の理解：達成
200 個の水からなるプロトン化した水の巨大クラスター及び 50 個程度の中性水分子クラスターの観測に成功し、構造決定に成功した（藤井朱）。また、7-アザインドール・水/アルコールクラスターの多重プロトン移動を観測し、溶媒分子の協調的な運動により反応が促進されることを発見し（関谷）、期待以上の成果を得た。
- (3) 生体分子など高次分子系を気化させる新手法の開発：達成
生体分子とそのクラスターを気相生成させるために、中赤外レーザーによるイオン化法（栗津）、金属ナノ粒子（米澤）、グラファイトマトリックス（藤井正）を用いて生体分子を気化させる新手法の開発に成功しただけでなく、レーザー蒸発機構を解明し（栗津、橋本-A02 藤野）、期待以上の成果を得た。
- (4) 孤立系における高次分子系の状態制御法の開発及び状態依存性の観測と理解：達成
クラスターの温度や分子間相互作用を制御し、溶媒和と溶媒分子数で誘起されたアラニルトリプトファンの異性化機構（富宅）、分子間相互作用を制御することによるクラウンエーテルの分子認識機構（江幡）について解明した。電荷分布、熱・量子ゆらぎシミュレーション法（鳥居、立川）の開発により、理論と実験の両方から高次分子系の構造と状態の解明に成功した。

A02 複合高次系：全て達成

- (1) 新しい分子計測法による界面現象の観測と理解：達成
ヘテロダイン検出電子/振動和周波分光法（田原）、二重共鳴振動和周波分光法（石橋）表面増強赤外分光法（山方）、水中で動作が可能なFM変調AFM（大西）などを開発・駆使し、これまで不可能であった観測を可能として、基本的界面現象の解明に大きな成果を上げた。
- (2) 超高速分子計測による分子複雑系のダイナミクスの観測と理解：達成
超高速分光を駆使して、反応する励起状態分子の連続的構造変化の実測（田原）から、種々の共役系高分子およびペンダントポリマーの励起ダイナミクスの解明（藤塚）までを行った。また、時間分解分光を用いてMALDIのメカニズム解明に成功した（藤野）。

(3) 時空間分解分子計測による不均一複雑系の観測と分子論的理解：達成

近接場顕微鏡、AFM、光学顕微鏡、時間分解中性子小角散乱法などを駆使して、高分子のセグメントの配向状態の可視化（青木）細胞表面ダイナミクスの観測（岡島）、脂質ナノディスクのダイナミクス観測（中野）に成功した。またアンテナ系膜タンパク質複合体を人工的に構築して性質を調べる（出羽・南後）など予想を超える成果を上げた。

(4) 新規な実験的あるいは理論的研究方法論の開発と応用：達成

近赤外ピコ秒時間分解ラマン分光システム（坂本）、X線反射率測定によるタンパク質構造情報を取得する手法（矢野）などの実験方法論を開発した。また単一量子ドットの発光測定を行い逆オージェ過程に対する知見を得た。さらに、二次非線形分光信号についての新しい理論を開発し、実験と共同して空気/水界面の構造に対して新しい解釈を与える（森田）など、実験、理論の両方において大きな成果を得た。

A03 生体高次系：全て達成

1) タンパク質ダイナミクス観測のための新しい手法の開発：達成

時間分解振動分光法、1分子計測法などタンパク質ダイナミクス観測のための新規計測手法の開発に成功した（水谷、松下、清水、楯）。なかでも1分子分光法では、単一タンパク質分子について、可視から近赤外の広い波長領域にわたり蛍光スペクトルを測定できるようにしただけでなく、赤外吸収スペクトルを観測することにも成功した（松下）。これは当初の予想を超える成果である。

(2) ダイナミクス観測・解析によるアロステリック機構の解明：達成

新規計測手法の特徴をシャープに活かすことによって、タンパク質の機能発現機構に関する研究が進展した。多くのヘムタンパク質、レチナールタンパク質などについて機能に関わる反応中間体やそこに至る構造変化をとらえることに成功した（水谷、小倉、清水、井上、平松、城）。また、新規計測法による発見は、われわれのタンパク質に対するイメージを変えつつある。例えば、タンパク質内で低障壁水素結合の存在を初めて見出した（片岡、上久保）ほか、プロトンポンプの一方向性に関する新たなモデルの提案（神取）、タンパク質内のドメイン運動における水分子の集団的な運動の発見（中迫）など、これまで知られていなかったタンパク質の新しい側面を明確に示した。理論研究（佐藤、城地）との連携もタンパク質の連動性発現機構の解明に大きく貢献した。

(3) 分光イメージングによる細胞内ダイナミクスの観測と反応機構の解明：達成

生細胞に関する計測でも当初の予想を超える成果が得られた。分光イメージングの研究では、アンチストークス蛍光の発生を発見し、植物細胞に含まれる複数の光合成タンパク質の識別に成功した（熊崎）。また新規顕微分光システムを開発し、生細胞を非染色でイメージングできることを実証した（加納、宇和田）。生細胞中のタンパク質観測の研究では、生細胞中のタンパク質一分子の動態解析に道を作った（飯野）ほか、in-cell NMR法により生きた大腸菌内のタンパク質の立体構造解析に世界で初めて成功した（伊藤）。

以上のように、研究開始時の目的は十分に達成され、中には予想を超える成果も得られた。

3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況

本領域「高次系分子科学（略称）」では分子科学とその関連分野で発達した計測技術と素過程的理解を融合し、新たな先端的計測方法論を創出しつつ実在分子高次系の分子論的理解を目指している。これには気相クラスター、凝縮相、生体分子研究など、従来は個別に発展してきた領域の研究者が分野の垣根を超えて緊密に連携することが必須であり、最も重要な課題と認識した。このために、領域運営として2つの対応策を講じた。

第1の対応策は合同班会議の開催である。本領域では個別の班毎の討論よりも班を超えた討論と連携が最も重要である。そこで班毎に分かれた班会議を行わず、3班合同の班会議を5回開催した。異なる分野間の連携を促すためには相互の研究の十分な理解と徹底的な討論が不可欠である。そこで、これらの班会議を合宿制とし、深夜までポスターセッションができる会場を準備し、時間の制限無く徹底的に討論した。

第2の対応策はミニ公開シンポジウムの開催である。これは当初計画に明示していなかったが、班を横断する特定のテーマに対して深く討論し、研究連携・共同研究を推進する事を狙った趣旨の対応策である。これを公開討論とすることで班員に限らず領域外部からも講演者・討論参加者を招くことができ、領域の活性化、研究成果の広報の点でも有効に機能した。テーマをシャープに絞ることにより、関係する班員だけで日程が調整でき、機動的に開催が可能である点も効果的である。領域設定期間中、16回のミニ公開シンポジウムを開催し、共同研究の促進にも大きな成果を上げた。

このような対応の結果、これまでに140件の共同研究が企画され3つ以上の研究グループの有機的な組み合わせによる規模の大きな共同研究も自発的に進んだ。これらは現在まで51報の共著論文として出版され、また53件のレポートにまとめて成果報告書に記載した。

これらの対応策にもかかわらず、領域研究の推進において3つの問題点が発生した。第1の問題は欠員の問題である。新しく発足した新学術領域研究（領域提案型）へ計画班としての参加するために領域前半において2名の公募班研究者が途中で辞退を余儀なくされた。これら2名は、個人の研究としてもアクティブであるだけでなく、共同研究の核になっており、計画班ではカバーしきれない研究分野を公募班で補っているという点でも途中辞退は大変大きな痛手であった。これを後半の公募研究で可能な限り補正したが、途中1年間の空白期間は避けられなかった。後半では特段に活発に共同研究を推進してきた公募班員八木氏（山梨大）が米国イリノイ大学に転出した。本領域並びにその研究を推進する班員の研究が国際的にも認められている事を示す異動であり喜ばしい事であった。しかし、中間評価でも一層の充実が望まれていた理論研究の中核研究者であり、本人と関わる共同研究の多さもあって残りの1年強を代替りの研究者を補充できずに領域を運営しなくてはならない事は大きな痛手であった。結局、八木氏が研究費の充当ができないにも関わらず班友として実験グループとの共同研究の推進を承知し、自費で班会議に参加するなど個人の研究にかける情熱と自己犠牲の精神により無事多くの共同研究を推進できた。しかし、新学術領域の重複制限に依る辞退と共に、欠員を補充できない事は制度上大きな問題であり、我々の対応できる範囲を超えた問題であった。

第2の問題は共同研究が順調に発展しているにもかかわらず、共同研究を支援する研究費がなかった点である。各研究者に配分されている研究費は、当初の研究計画の内容に対するものであり、共同研究にかかる研究費は考慮されていない。幸い本領域は中間評価で高い評価を頂き、追加予算を頂戴できたので、これを全て共同研究の支援に振り向けて対応した。

第3の問題は東日本大震災の影響である。特に、A01班計画班員の藤井朱鳥グループ（東北大学）が被災し、3月から実験が実施できない状態となった事である。これに対し本領域内からも装置の復旧・再立ち上げへの協力、一時貸与などの協力を呼びかけ、早期復旧に協力した。

以上の様に、全員の努力により問題に対応し、領域の目的達成に向かって前進する事が出来た。

4. 主な研究成果

A01班は気相から生体分子へのアプローチに成功し、凝集相、生体分子研究と連動できる基礎手法を作り上げた。A02班は凝縮相基本分子から界面、人工的膜タンパクモデル系を縦断する研究を行い、分子に於ける運動性の階層性に切り込んだ。A03班は新規計測手法の開発とA01, A02班に連携する分子運動の基礎過程解明に基づきタンパク質の運動性機構の解明に向けて研究を推進している。以上の進展は高次機能分子に対して気相、凝集相、生体分子研究者の共同研究を可能とし、領域を超えた新たな分子科学の端緒として領域に大きなインパクトを与えた。

A01 分子高次系：

タンパク質などの生体関連分子とそのクラスターを気相生成させるために、中赤外レーザーによるイオン化法（栗津）、金属ナノ粒子（米澤、A02 藤野）、グラファイトマトリックス（藤井正）を用いた生体分子を気化させる新手法の開発に成功した。新規レーザー蒸発法を用いて、5残基をもつペプチドの分子構造の解明、リン酸を含む塩基ヌクレオチドとその水和物の分子のコンホメーションと分子間相互作用の解明に成功した（藤井正、三枝）。また、神経伝達物質の構造研究から分子認識に関与する異性体数の特異性を明らかにし（藤井正）、気相における生体分子の構造と分子間相互作用の理解を深めた。

マトリックス支援レーザー脱離イオン化（matrix-assisted laser desorption/ ionization; MALDI）は、タンパク質など生体高分子の質量分析におけるイオン化法として広く用いられているにもかかわらず、そのメカニズムは解明されていなかった。テトラセンをドーピングしたアントラセン結晶のレーザー蒸発機構について、フェムト秒レーザー分光と質量分析法を組み合わせることにより解明した（橋本-A02 藤野）。また、中赤外レーザーと紫外レーザーを用いたMAIDIの研究から、これまでMALDIの理論モデルで無視されていた試料溶媒に注目し、溶媒の水がイオン化に強く影響していることを明らかにし、タンパク質の蒸発機構を解明するための有力な手掛かりが得られた（栗津）。これらの研究をもとに、イオン化効率や再現性の向上し、MALDIのさらなる応用拡大や、バイオ・医療研究の発展に寄与することが期待できる。

分子の協調的な運動の解明に向けて、7-アザインドール・水/アルコールクラスターの水素結合ネットワークの多重プロトン移動について系統的な研究を行い、1:2クラスターにおける多重プロトン移動が、溶媒分子が協調的に運動することにより起こることを明らかにした（関谷）。溶媒分子の協調的な運動は、特定の分子間振動が励起されたときに多重プロトン移動が効率的に起こる振動状態選択性の起源となることも明らかにされた。さらに、7-アザインドール・水1:3クラスターの励起状態において、水素結合ネットワークの異性化反応を初めて発見した（関谷）。タンパク質表面の水和水が結合したモデル系としてホルムアニリド・水クラスター及びアセトアニリド・水クラスター（AA-H₂O）のイオン状態における水分子の転移について研究し、C=O基からNH基への転移の発見した（関谷）。AA-H₂Oのイオン状態の水分子の転移機構をピコ秒時間分解赤外分光法によって研究し、水の転移において反応中間状態（図1）が存在することを発見し、水分子の転移ダイナミクスの実時間測定に成功した（藤井正）。

ジベンゾ-18-クラウン-6-エーテル（DB18C6）が包接するゲスト分子を認識し構造変化することを発見した（江幡）。電気スプレイイオン化/22極子イオントラップを用いた極低温下でのアルカリ金属イオン（M⁺）とDB18C6との包接錯体[M⁺@DB18C6]の電子スペクトル、振動スペクトルの観測にはじめて成功し、DB18C6は、包接する金属イオンの大きさによってその構造を大きく変え、最も安定な包接錯体を形成することを発見した（江幡）。これらは、気相における高次系分子の分子認識機構を解明した先駆的な成果である。

気相から凝集相へのブリッジとして、200個の巨大なプロトン化した水クラスターを観測し、その構造を明らかにした（藤井朱）。また、中性の水分子の50個程度の大サイズクラスターの水素結合ネットワーク構造の研究を行い、水素結合ネットワーク構造が小サイズクラスター特有の4員環構造からより一般的な5, 6員環構造へと移行していく過程（図2）を初めて捉えた

(藤井朱)。本研究の成果は、クラスター研究の新たな方向性を与えるとともに、氷など実在系の水素結合ネットワークの理解に繋がるものである。

クラスター温度を精密に制御できる装置を作成し、アラニンを N 末端に付加したジペプチドの温度変化、溶媒効果を調べることにより、温度上昇または溶媒和にともない、ペプチドが閉じた構造からプロトンの影響の小さい開いた構造へ異性化が起こることを発見した (富宅)。2-フェニルエタノール・水の 1:1 クラスターの基底状態においては、OH 基の O 原子に水分子が結合した構造と H 原子に水分子が結合した構造が観測される。ところが、クラスターイオンに内部エネルギーを与えると、3 個以上のポテンシャル極小間を水素結合構造が揺らぐことを発見した (関谷)。クラスターの温度制御と水素結合ネットワークの揺らぎの観測の成功は、孤立状態と凝集状態の高次系分子を繋ぐ研究を促進させるものである。

理論研究は、実験研究を支援しただけでなく、実験からは得られない新奇な情報も提供した。振動縮退摂動論の開発により、ペプチドなど大サイズの生体分子の分子振動の非調和性について精密な解析が可能となった (八木)。電荷フラックスからペプチドの赤外強度を解析する理論 (鳥居) や熱・量子揺らぎシミュレーション法を開発し、大サイズクラスターの水素結合構造、クラスター構造の温度変化、プロトン・電荷移動の理論的解明に成功した (立川)。

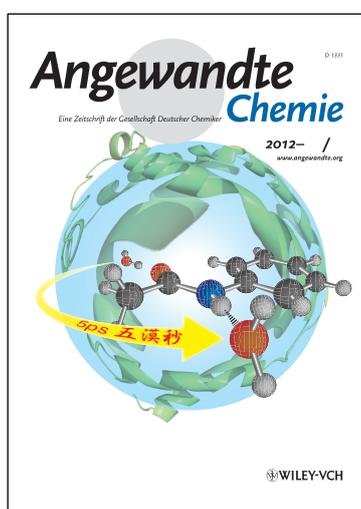


図 1. ペプチド-水モデルクラスターで水の転移をピコ秒時間分解分光で直接観測に成功
Ang. Chem. Int. Ed. 印刷中, VIP論文、内表紙

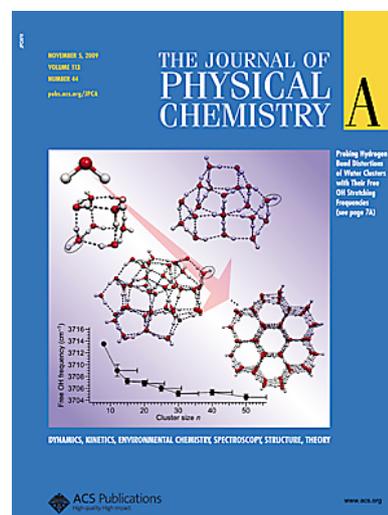


図 2. 水素結合ネットワーク構造の 4 員環構造から 5、6 員環構造への移行の観測に成功した。
J. Phys. Chem. A, Vol. 113, No.44 (2009)の表紙

A02 複合高次系：

界面に関する研究については、新しい界面選択的なヘテロダイナミック検出電子/振動和周波発生分光法を開発し、界面分子に関して、溶液の分子に対する紫外・可視吸収スペクトル、赤外・ラマンスペクトルと同等の質のスペクトルが測定可能になった (田原)。また水界面の非線形分光信号をシミュレーションする新しい理論を開発し、ヘテロダイナミック検出振動和周波発生分光実験と共同して、世界的な論争になっていた空気/水界面の構造に対して新しい解釈を与えた (森田・田原)。固液界面の物性と機能を分子論的に理解することをめざして、さまざまな固体とそれに接する液体の構造を原子間力顕微鏡を用いて計測する方法論の構築を目標に研究を進めた。顕微鏡探針にかかる力をカンチレバー振動の共振周波数変化として検出する FM モードの原子間力顕微 (FM-AFM) を用いて pN オーダーの分解能で力を計測すると、固体表面の凹凸ばかりでなく、液体密度分布の濃淡に起因する力の変調を検出できる。水/マイカ、水/TiO₂、水/Al₂O₃、水/親水性単分子膜、アルカン/疎水性単分子膜、水/p-ニトロアニリン結晶などの液体構造を計測した。これらの成果を世界にむけて発信し FM-AFM が界面液体の局所構造を計測する

ツールとなることを示した（大西）。機能を持つ分子高次系の解明のための計測法としての振動和周波発生（VSFG）分光法の可能性を開拓するため、電子共鳴条件下の VSFG 分光（電子振動二重共鳴 SFG 分光）による研究を行った。紫外プローブによる芳香族単分子膜の高選択高感度測定、薄膜のキラリティ検出、水中での単分子膜の指紋領域振動 SFG スペクトルの測定法等、二重共鳴 SFG 分光の様々な応用技術の開発に成功した（石橋）。電気化学システムと表面増強赤外分光法を組み合わせることで水中での有機カチオンの電極近傍の水和構造の変化の観察に成功し、その疎水性水和殻の破壊を初めて明らかにした（山方）。金属表面の研究では、Cu(110)表面上に吸着した水分子を走査トンネル顕微鏡で観察し、水素原子が水素結合を介して移動する様子を捉えることに成功した。低温の銅表面上では水は1分子で存在でき、人為的に2個、3個と繋げることもできる。水分子1個と水素が一つ抜けた水（水酸基）4個が水素結合によって一列に連なった化合物を作製し、水分子の1個の水素原子が水酸基をリレー形式で伝わり、端に新しく水分子が生成することを確認した。（奥山）

超高速分光に関する研究については、基本多原子分子系の分子内連動性に関して、シス-スチルベンの反応ダイナミクスを10フェムト秒パルスによる時間分解インパルスラマン分光法により研究し、反応する励起状態分子の連続的構造変化の実測に成功した（田原）。2量体からポリマーに至る分子系では、アセチレン基連結ピレン二量体において構造変化と電子緩和が連動して励起エネルギーが非局在-局在-非局在するプロセスを見出した（浅野）。さらに、種々の共役系高分子およびペンダントポリマーにおける電荷と励起エネルギーの移動および非局在過程さらに構造変化を明らかにするため、超高速分光を用いて研究した結果、光捕集機能性高分子や枝分かれ状高分子オリゴマーのエネルギーマイグレーション過程、共役系高分子 dendrimer の励起緩和に伴う構造変化、多層のベンゼン環アレイにおける正および負電荷非局在、DNA 内での負電荷移動ダイナミクス、オリゴチオフェンの高励起状態反応過程等について新たな知見を得た（藤塚）。さらに、超高速分光を用いて、マトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI）法のメカニズムの解明を行った。MALDI 法は、生体試料に代表される高次機能性分子を壊さず気相中に取り出すことのできる質量分析において大変重要な手法である。試料調整や測定が簡単である一方、そのイオン化のメカニズムが不明であること、また低分子量試料の分析には適さないなどの問題点があった。時間分解分光法を用いたダイナミクス研究を行い、これまで不明であった MALDI の反応素過程を解明した。またこのメカニズムの理解にもとづいて MALDI 法の弱点を克服する新しいイオン化法を開発した（藤野）。

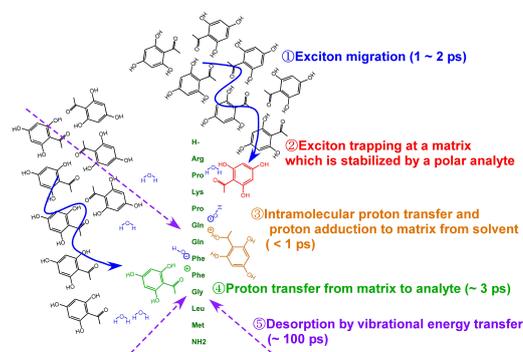


図3 超高速分光で明らかになった MALDI の機構

時空間分解分子計測に関する研究では、原子間力顕微鏡（AFM）および光学顕微鏡技術を用いた単一細胞表面・界面ダイナミクスに関する研究を行った。まず、AFM と1分子蛍光計測技術等を組み合わせた細胞膜分子のダイナミクス計測法を用いて、細胞界面のメカニクスとダイナミクスとの同時計測を実現した。また、細胞膜と種々の人工脂質分子との相互作用を明らかにした。さらに、細胞表面ダイナミクスの定量計測を実現すべく、細胞周期に着目した細胞ダイナミクス計測を行った。細胞膜および細胞膜下の細胞骨格のダイナミクスが、細胞周期に強く依存することを見いだした（岡島）。光の回折限界を超える新しい顕微鏡システムを開発することで、数10nmの空間分解能で高分子鎖のコンホメーションおよび鎖内部のセグメントの配向状態を可視化することに成功した。これにより、超薄膜状態におけるブロック共重合体高分子鎖のコンホメーションがバルク系と比較して著しく伸張した形態をとっていることを明らかにした。また、高分子材料表面に摩擦力がかかった際

の鎖の配向挙動について研究し、摩擦においては表面のごく近傍のみのセグメントの局所的な配向のみが誘起されることを明らかにした（青木）。複合的な高分子系として、光合成でのアンテナ系膜タンパク質およびそのモデルタンパク質色素複合体を人工的に構築し、配向を制御した色素複合体の基板上での組織化を世界に先駆けて成功した。システインあるいは His-tag 有する光合成膜タンパク質（LH1-RC）変異体を作成し、電極基板上に分子配向を制御して固定化することができ、配向に依存した光電流応答を示した。また、電流検出 AFM により、分子レベルで LH1-RC の整流特性を検出することに成功した。さらに、脂質二分子膜中に再構成した膜タンパク質集合体（LH1-RC/LH2）の AFM による高解像度観察により、脂質成分に依存して集合構造が変化することを見出し、超分子集合構造の違いが LH2 から LH1-RC へのエネルギー移動に影響を及ぼしていることを明らかにした（出羽・南後）。

新規な実験的あるいは理論的研究方法論の開発と応用については、既に述べた研究のみでなく、以下の研究でも大きな成果を上げた。まず、タンパク質の界面変性現象を X 線反射測定で研究する手法を開発した。生体が物質を認識する、ということは、物質表面にタンパク質が吸着することによって起こる。また、人工組織や生体物質を使った新しい機能性材料の開発など、医学的および技術的応用の両面においても生体物質と界面の相互作用を知ることは非常に重要である。そこで、X 線反射率とその周囲に生じる微弱な散乱を精度良く計測することにより、タンパク質の界面垂直・水平方向の構造情報を同時に取得する手法を確立した。これを用いて様々な条件におけるタンパク質の界面変性現象について観測し、結果を体系化することに成功した（矢野）。時間分解中性子小角散乱法を、脂質 DMPC と apoA-I からなるナノディスクについて適用し、DMPC の粒子間移動速度がベシクルの場合と比べて約 20 倍も速いことを明らかにした。温度依存性の評価から、ナノディスクからの脂質の解離は、ベシクルの場合と異なり、エントロピーの増加を伴うことを見いだした。また、蛍光プローブ n-AS の蛍光寿命、定常光蛍光異方性から、ナノディスク中ではベシクル中と比べ DMPC がより密にパッキングしていることが明らかになった。これらの結果より、ナノディスク中の脂質の密なパッキングが、通常はエントロピー的に不利なはずの解離プロセスを促進させていることを明らかにした（中野）。単一量子ドットの発光明滅現象の解析から、オージェ効果で発生した電子捕捉が環境で大きく変化する事、CdSe 量子ドット欠陥発光の単一スペクトルはバンド幅が狭く、時間拡散することを明らかにした。また、量子ドットのオージェ再結合に及ぼすサイズおよび界面依存性を解析したところ、界面保護剤に関係無く $\tau_{Auger} \sim D^{6.0}$ の関係を示した。単一励起子は界面効果を強く受けるが複数励起子のオージェ再結合は、表面単分子程度の保護剤や欠陥には依存せず、界面層に勾配を持つような電子状態変化が重要であることがわかった（玉井）。近赤外光（1064 nm）をプローブ光としたピコ秒時間分解ラマン分光システムを製作し、 β -カロテン $S_2(1Bu^+)$ 状態のピコ秒時間分解共鳴ラマンスペクトルの測定に成功した。システムの改良を行い、9、9'-ビアントリルの光励起

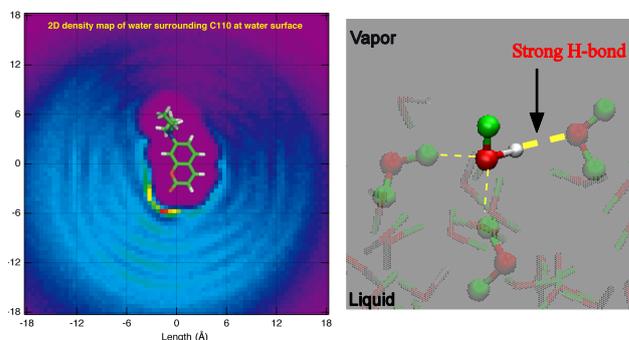


図4 新しい界面選択的非線形分光とシミュレーションで明らかになった界面分子の水和構造と空気/水界面の構造

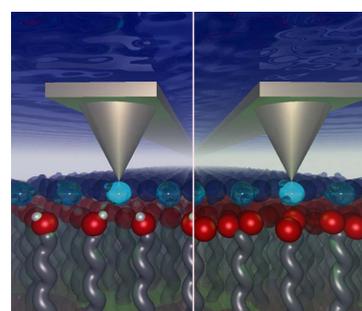


図5 新しい界面選択的非線形分光とシミュレーションで明らかになった界面分子の水和構造と空気/水界面の構造

状態に応用した。トランス-スチルベン S_1 状態の近赤外光励起（非真性共鳴）過渡ラマンスペクトルを測定し、時間依存密度汎関数法による振動解析を行った。また、ピコ秒時間分解赤外分光法により共役高分子の光励起ダイナミクスを解明した。さらに、フェムト秒近赤外パルスで近接場照射し、ポリジアセチレンをナノスケールで生成することに成功した。近赤外光励起面測定ラマンイメージング装置も製作した。（坂本）

A03生体高次系：

タンパク質ダイナミクス観測のために新規計測手法の開発に取り組み、ユニークかつ高性能の計測システム開発に成功した。時間分解共鳴ラマン分光法では、共鳴効果をフルに利用してタンパク質内のさまざまな部位をピコ秒からミリ秒の幅広い時間帯について観測できるようにした（水谷）。これによって、リガンド脱離や光異性化反応などタンパク質の局所的な構造変化がトリガーとなりタンパク質分子全体にわたる広範囲な構造変化が連動的に起きる様子を観測可能になった。極低温での単一分子分光法では、独自の液体ヘリウム用一体成形反射対物レンズを開発し、単一タンパク質分子について可視から近赤外の広い波長領域にわたり蛍光スペクトルを測定できるようにした（松下）。さらに、赤外光照射によって蛍光強度が変化する現象を発見し、これを利用してタンパク質一分子の赤外吸収スペクトルを計測することに成功した。赤外吸収スペクトルは蛍光スペクトルに比べより豊富な分子の構造情報を含む。したがって、一分子赤外吸収スペクトル計測の成功は、タンパク質分子の構造不均一性と揺らぎについて化学結合レベルで議論する道が開けたことを意味する。エックス線1分子計測法では、観測チャンバーの素材、チャンネルタンパク質の固定方法の見直し、およびX線イメージインテンシファイアと高速カメラの導入により、従来の30フレーム/秒から5000フレーム/秒の高速化を実現した（清水）。これにより、タンパク質1分子の構造変化を連続的に追跡できるようになった。この観測速度はイオンチャンネルの機能測定法である1分子電流計測法と同等の観測速度であり、分子の動きと機能を同じ時間分解能で計測できるようになった点は画期的である。この技術を用いてイオンチャンネルの開閉構造変化の一分子動画計測に高速度観測に世界で初めて成功した。

先端的計測手法を用いた研究によって、タンパク質の機能発現メカニズムの解明が進んだ。代表的なアロステリックタンパク質であるヘモグロビンについて生理的に重要な構造ダイナミクスをとらえることに成功した（水谷）。これまでヘモグロビンの構造ダイナミクス研究では、生理的なリガンドである酸素の代わりに、一酸化炭素がリガンドとして主に用いられてきた。これは酸素を用いた時間分解測定が困難であるためである。しかし一酸化炭素を用いた実験では酸素運搬体であるヘモグロビンの真の姿をとらえているか疑問が残る。ここでは高感度の時間分解共鳴ラマン分光システムを用いることによって酸素を用いた時間分解測定の困難を克服し、ヘモグロビンの生理的に重要な構造ダイナミクスを観測した。また、いくつかのヘム含有酸素センサータンパク質についても、（水谷）。生理的なリガンドを用いる重要性は、酸素ガスセンサータンパク質の構造ダイナミクス研究においても実証された。これらのタンパク質についても実験上の難しさから生理的なリガンドである酸素を用いた研究は皆無で、代わりに非生理的なリガンドである一酸化炭素を用いたものばかりであった。しかし、センサータンパク質は酸素とそれ以外のガス分子を識別しているため、センシングに関わっている構造変化はリガンドとして酸素を用いなければわからない。この研究においても時間分解共鳴ラマン分光装置の高性能化により、酸素に特異的なタンパク質ダイナミクスを見出し、センシングおよびリガンド識別に関わる構造変化を実時間で捉えることに成功した。また、領域内の共同研究によって、いくつかの光センサータンパク質について光受容に伴う構造変化を明らかにした（水谷）。タンパク質の水素結合ネットワークに関する研究においても大きな成果が得られた。中性子回折法により、光センサータンパク質イエロープロテインに含まれる水素結合に関わる全ての水素原子の位置を決定した。この精緻な実験データに基づきタンパク質内で低障壁水素結合の存在

を世界で初めて証明した点は本特定領域研究が誇るべき成果である（片岡）。さらにイエロープロテインの機能発現機構について新たなモデルを提案するにも至った。これらの成果を中心としたタンパク質の中性子回折研究の成果が評価され、片岡は平成23年度日本中性子学会学会賞を受賞した。また、光反応に伴うアミノ酸残基の水素結合変化を低温赤外分光法および遺伝子工学的手法を用いて詳細に解析し、水素結合ネットワークを通じたプロトンポンプの一方向性に関する新たなモデルを提案した（神取）。水素結合ネットワークはタンパク質内だけではなく、それをとりまく環境、すなわち水和においても極めて重要である。X線結晶構造解析による研究では、水和水のタンパク質内のドメイン運動において水分子の集団的な運動が存在することを明らかにしたことに加え、データベース解析により経験的水和分布関数の構築と水和構造予測にも成功した（中迫）。タンパク質の運動性やその内部水の分布に関しては、理論研究（佐藤、城地）との連携もそれらの理解に大きく貢献した。さらに新規計測法はタンパク質構造の不均一性と揺らぎに関する新しい知見を与えた（松下）。極低温における単一タンパク質の蛍光スペクトルに、スペクトルジャンプやスペクトル拡散と呼ばれる時間変化を観測した。タンパク質中の補因子色素一個の吸収波長が変化する頻度の温度依存性を調べたところ、頻度が温度に依存せず一定であるような、量子力学的なトンネル過程を発見した。温度数Kの有機固体でのトンネル過程として知られているものは、プロトンが関与するものばかりであり、タンパク質中で今回見つかったトンネル過程は水素結合のプロトンの動きであると考えられる。本特定領域研究では、新規なタンパク質の発見においても大きな成果を挙げている。これまで謎であった緑認識ロドプシンを真正細菌から初めて単離し、その発色および機能発現メカニズムを明らかにした（須藤）。また、トランスデューサー全長タンパク質を光センサータンパク質との融合タンパク質として発現することに初めて成功した（須藤）。微生物型ロドプシンとしては初めて11-cis型のレチナールを発色団としてもつレチナールタンパク質を発見し、これをMiddle Rhodopsin (MR)と名付けた（須藤）。これらの新規タンパク質については、領域内の共同研究により分光学的キャラクタリゼーションが行われ、すでに共著論文として成果を発表している。

タンパク質をはじめとする生体分子は細胞中で機能する分子である。したがって、単離精製したタンパク質に対する理解が進んできた現在、これらの分子が“ホームグラウンド”である生細胞中でどのように振る舞っているのかという問題に目を向けていくことは次のステップの分子科学、タンパク質科学として極めて重要である。本特定領域研究でも生細胞中の生体分子の観測についてもユニークな研究が進展した。そのなかから顕著な成果を紹介する。蛍光標識あるいは蛍光タンパク質との融合によって、生細胞を蛍光でイメージングする技術が発展している。しかし生細胞観測にこれらの技術が成果を挙げている一方、修飾による生細胞への影響も指摘されており、非染色で細胞をあるがままで観測する技術開発が求められている。本特定領域では、ナノ秒白色レーザーを用いてCARS分光イメージングシステムを開発し、生細胞の“ラベルフリー・マルチカラー”分光イメージングが達成できることを実証した（加納）。また、クロロフィルからのアンチストークス蛍光の発生を発見し、これを利用して植物細胞に含まれる複数の光合成タンパク質の識別に成功した（熊崎）。これらイメージングに加え、生細胞中のタンパク質分子の観測でも成果を挙げた。生細胞中のタンパク質一分子の動態解析に道を作った（飯野）ほか、in-cell NMR法により生きた大腸菌内のタンパク質の立体構造解析に世界で初めて成功した（伊藤）。

5. 研究成果のとりまとめの状況

(1) 各年度の報告書

領域を開始した平成19年度から23年度まで毎年度報告書を取りまとめて報告している。報告内容は国際対応を意識して和英双方で記載している。同時に、5回の公開シンポジウム、6回の合同班会議においても要旨を和英で作成している。16回のミニシンポジウム、そして領域終了後の成果報告会もこれに準じて原則として和英で要旨を作成して報告している。

(2) 最終報告書を作成

領域全期間の成果報告書も既に作成を終えている。これも和英双方で成果を記載してある。また、領域全期間の成果、業績など提出が求められている内容に加え、共同研究に関する53報のレポートを和英で収録した。

(3) 学会誌等の特集号編纂

日本分光学会の学会誌「分光研究」2008年57巻4号並びにレーザー学会の学会誌「レーザー研究」2009年37巻10号において、それぞれ「分子機能解明を目指す分光学的フロンティア」及び「生体分子機能解明に向けた最新レーザー計測法」と題する特集号が企画された(中間評価報告済)。

さらに、伝統ある国際学術誌 *Chemical Physics* 誌が “Molecular Science for Supra Functional Molecular System” と題する Special Issue を企画し、藤井(領域代表)が Corresponding Guest Editor として編纂に当たっている(右の論文受付の web 画面参照)。本特集号は2012年10月末日で受付を終了するが、それ以前でも論文が受理され次第 web で電子出版される。なお、印刷体は、2012年12月に出版される予定である。

(4) ニュースレター

本領域が発足した2007年10月以降、毎月1号、合計54号を電子発行した。領域のホームページに掲載すると同時に関係各方面へ配信した。内容は論文紹介、受賞、新聞掲載の案内、シンポジウム報告などである。例を次ページに示す。



文科省科研費「特定領域研究」領域番号477 領域代表者 藤井正明(東工大資源研)

分子高次系機能解明のための分子科学 — 先端計測法の開拓による素過程的理解

● No.47 ニュースレター 2011年8月号 pdf 582KB 

【業績紹介】

超原子価クラスター $[(CH_3)_2NH]_m(NH_3)_n-H$ の構造と安定性：微視的溶媒和と水素原子の局在化位置のスイッチング

富宅 喜代一 (神戸大院理・計画研究代表者)

石川 春樹 (神戸大院理・計画研究分担者)

山田 勇治 (福岡大理)

【開催報告】

第5回 公開シンポジウム 開催報告

藤井 正明 (東工大資源研・総括班)

▲ ページの先頭へ

● No.46 ニュースレター 2011年7月号 pdf 766KB 

【業績紹介】

電場の中におかれた光励起キャリアーの再結合過程

山方 啓 (北大触媒・A02 公募班)

液体界面で見られるタンパク質の塩析現象

矢野 陽子 (近畿大理工・公募班研究代表者)

【開催報告】

The 15th International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS XV) 報告

鳥居 肇 (静岡大教育・A01 班)

【受賞】

田原グループの倉持光君がThe 15th Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS XV)

最優秀ポスター賞を受賞

田原 太平 (理研・A02 計画研究代表者)

▲ ページの先頭へ

業績紹介：電場の中におかれた光励起キャリアの再結合過程

山方 啓 (北大触媒・A02 公募班)

論文題目: " Potential-Dependent Recombination Kinetics of Photogenerated Electrons in n- and p-Type GaN Photoelectrodes Studied by Time-Resolved IR Absorption Spectroscopy"
著者: Akira Yamakata*, Masaaki Yoshida, Jun Kubota, Masatoshi Osawa, and Kazunari Domen
雑誌巻号: *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 11351-11357 (2011)

光エネルギーを化学エネルギーに変換する光触媒や光電極は、エネルギー問題や環境問題を解決する手段として注目されている。これらの触媒の活性は、光励起キャリアの寿命や電荷移動速度に依存するため、そのメカニズムを調べるためには、光励起キャリアの挙動を明らかにする必要がある。我々は、これまでに時間分解赤外分光法を用いると、光触媒の光励起キャリアの挙動を明らかにできることを報告している¹⁾。本研究では、この手法を電極系にも応用し、バイアス電圧の印加で光励起キャリアの挙動がどのように変化するかを調べた。光電極はバイアス電圧の印加で反応活性が変化する。そこで、本研究では、電気化学条件下での光励起キャリアの挙動を時間分解赤外分光法と電位変化測定から追跡した。

水を光電気化学反応で分解できる GaN のバンドギャップを励起すると、図 1(A)のように中赤外域に干渉

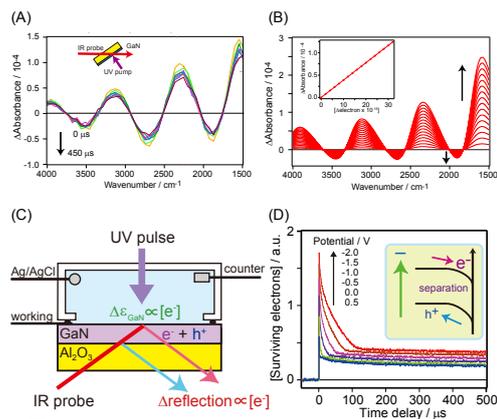


図 1
(A) GaN を光励起して観測された赤外域の干渉縞。(B) 光励起電子数に依存した GaN の屈折率を考慮した干渉縞を計算で再現。(C) 光電極系での時間分解赤外分光測定。(D) GaN に生成した光励起電子の再結合過程の測定例。

縞が現れた。バンドギャップを励起すると、光励起電子が生成し、屈折率が変化する。そこで、屈折率を変化させ、赤外スペクトルをシミュレーションすると、図 1(B)のように実験結果を良く再現できることが分かった。つまり、干渉縞の測定から薄膜半導体中の光励起電子の減衰過程を高感度観察できることが分かった。そこで、つぎに図 1(C)のような反射配置で光電極中に生成した光励起電子の減衰過程のバイアス依存性を調べた。

図 2A に p 型 GaN 電極に紫外パルスを照射して測定した 2050 cm^{-1} における赤外反射率の時間変化を示す。光励起電子の生成により反射率が低下し、0-20 μs で減衰する成分とそれ以降に減衰しない長寿命の成分が観測された。この光励起電子の減衰速度は、電位が低くなるにつれて遅くなり、長寿命の成分も増加した。p 型半導体の場合、電位を低くするとバンドベンディングが大きくなり、電子・正孔の分離効率が促進される。

つぎに、電極電位の変化を直接測定したのが図 2B である。電位はまず負方向に変化し、それからゆっくりと正方向にシフトすることが分かった。この複雑な変化は半導体中の光励起電子の動きで説明できる。バルク中で伝導帯に励起された電子は、フェルミ準位を上げるため、まず電極電位を負方向に変化させる。しかし、バンドベンディングに沿って電子が表面に移動してくると、バルクのフェルミ準位は下がってくるため、電位は正方向に変化する。つまり、赤外分光測定と電位変化測定を直接比較することで、半導体中のキャリアの複雑な動きを理解することができる。

1) A. Yamakata et al. *Chem. Phys. Lett.* **333**, 271 (2001), *J. Phys. Chem. B* **105**, 7258 (2001).

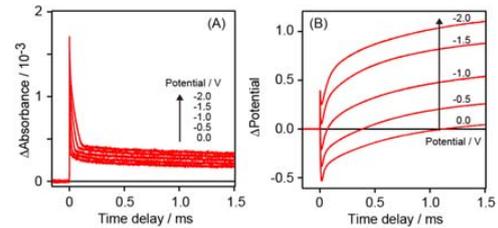


図 2
p 型 GaN 光電極に生成した光励起電子の減衰過程(A)と照射前後の電位変化(B)。p 型半導体のバンドベンディング(C)。

6. 研究成果の公表の状況

(1) 主な論文等

○ 成果リスト (原著論文 974 編、総説・解説 188 件、国際会議発表 896 件)

A01 班

関谷博 計画研究課題

【原著論文】

- 1) K. Sakota, C. Jouvét, C. Dedonder, M. Fujii, *H. Sekiya,
“Excited-state triple-proton transfer in 7-azaindole(H_2O)₂ and reaction path studied by electronic spectroscopy in the gas phase and quantum chemistry calculations”,
J. Phys. Chem. A, **114**, 11161-11166 (2010).
- 2) T. Ikeda, K. Sakota, Y. Kawashima, Y. Shimazaki, Hiroshi Sekiya*
Photoionization-induced water migration in the hydrated trans-formanilide cluster cation revealed by gas-phase spectroscopy and ab initio molecular dynamics simulation, *J. Phys. Chem. A*, **116**, 3816–3823 (2012).

ほか 43 編

【総説・解説】 3 件

【国際会議発表】 63 件 (うち Invited 20 件)

藤井朱鳥 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Kenta Mizuse, Naohiko Mikami, *Asuka Fujii
“Infrared spectra and hydrogen-bonded network structures of large protonated water clusters $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=20-200$)”
Angew. Chem. Int. Ed. **49**, 10119-10122 (2010).
- 2) Toru Hamashima, Kenta Mizuse, *Asuka Fujii
“Spectral signatures of 4-coordinated sites in water clusters: Infrared spectroscopy of phenol-(H_2O)_n ($\sim 20 < n < \sim 50$)”
J. Phys. Chem. A **115**, 620-625 (2011).

ほか 30 編

【総説】 2 件

【国際会議発表】 39 件 (うち Invited 14 件)

藤井正明 計画研究課題

- 1) Kohei Tanabe, Mitsuhiko Miyazaki, Matthias Schmies, Alexander Patzer, Markus Schütz, Hiroshi Sekiya, Makoto Sakai, Otto Dopfer and *Masaaki Fujii,
"Watching Water Migration around a Peptide Bond"
Ang. Chem. Int. Ed. in press (DOI:10.1002/anie201203296)
- 2) Shun-ichi Ishiuchi, Haruhiko Mitsuda, Toshiro Asakawa, Mitsuhiko Miyazaki, *Masaaki Fujii
“Conformational reduction of DOPA in the gas phase studied by laser desorption supersonic jet laser spectroscopy”
Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 7812-7820 (2011).

【原著論文】

ほか 80 編

【総説】 20 編

【分担執筆】 3 編

【国際会議発表】 54 件 (うち Invited 17 件)

粟津邦男 計画研究課題

【原著論文】

- 1) *Hisanao Hazama, Hidetoshi Yoshimura, Jun Aoki, Hirofumi Nagao, Michisato Toyoda, Katsuyoshi Masuda, Kenichi Fujii, Toshio Tashima, Yasuhide Naito, Kunio Awazu

“Development of a stigmatic mass microscope using laser desorption/ionization and a multi-turn time-of-flight mass spectrometer”

J. Biomed. Opt. **16**, 046007 (2011).

- 2) *Hisanao Hazama, Katsunori Ishii, Kunio Awazu

“Less-invasive laser therapy and diagnosis using a tabletop mid-infrared tunable laser”

J. Innov. Opt. Health Sci. **3**, 285–292 (2010).

ほか 39 編

【総説】 12 編

【分担執筆】 9 編

【国際会議発表】 70 件（うち Invited 5 件）

富宅喜代一 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Akimasa Fujihara, Hiroyuki Matsumoto, Yohei Shibata, Haruki Ishikawa, and *Kiyokazu Fuke,
“Photodissociation and Spectroscopic Study of Cold Protonated Dipeptides”,
J. Phys. Chem. A, **112**, 1457 - 1463 (2008).

- 2) Akimasa Fujihara, Naoki Noguchi, Yuji Yamada, Haruki Ishikawa, and *Kiyokazu Fuke,
“Microsolvation and Protonation Effects on Geometric and Electronic Structures of Tryptophan and Dipeptides”,
J. Phys. Chem. A **113**, 8169 – 8175 (2009).

ほか 8 編

【総説】 1 編

【著書】 1 編

【国際会議発表】 21 件（うち Invited 2 件）

米澤徹 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Tetsu Yonezawa, Hideya Kawasaki, Akira Tarui, Takehiro Watanabe, Ryuichi Arakawa, Toshihiro Shimada, and Fumitaka Mafuné
“Detailed Consideration of Ability of Various Metal Nanoparticles for Surface-Assisted Laser Desorption/Ionization Mass Spectrometry”
Analytical Sciences, **25(3)**, 339-346 (2009).

- 2) Hideya Kawasaki, Teruyuki Yao, Takashi Suganuma, Kouji Okumura, Yuichi Iwaki, Tetsu Yonezawa, Tatsuya Kikuchi, and *Ryichi Arakawa
“Platinum Nanoflowers on Scratched Silicon by Galvanic Displacement for an Effective SALDI Substrate”
Chem. Eur. J., **16**, 10832-10843 (2010).

ほか 36 編

【総説】 7 編

【著書】 3 編

【分担執筆】 3 編

【国際会議発表】 12 件（うち Invited 1 件）

赤井伸行 公募研究 (AKAI Nobuyuki Proposed Research Group)

【原著論文】

- 1) *Nobuyuki Akai, Akio Kawai, Kazuhiko Shibuya
“Water assisted photo-oxidation from hydroquinone to p-benzoquinone in a solid Ne matrix”
J. Photochem. Photobiol. A., **223**, 182-188 (2011)

- 2) Daisuke Wakamatsu, *Nobuyuki Akai, Akio Kawai, *Kazuhiko Shibuya
“Red-Light Induced Photoreaction of DMS-O₃ Complex in a Cryogenic Neon Matrix”
Chem. Lett. **41**, 252-253 (2012).

ほか 14 編

【国際会議発表】 23 件（うち Invited 1 件）

鳥居肇 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Hajime Torii
“Intermolecular electron density modulations in water and their effects on the far-infrared spectral profiles at 6 THz”
J. Phys. Chem. B **115** (20), 6636-6643 (2011).
- 2) *Hajime Torii
“Intra- and intermolecular charge fluxes induced by the OH stretching mode of water and their effects on the infrared intensities and intermolecular vibrational coupling”
J. Phys. Chem. B **114** (42), 13403-13409 (2010)

ほか 3 編

【国際会議発表】 9 件（うち Invited 3 件）

江幡孝之 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Naoya Hontama, Yoshiya Inokuchi, *Takayuki Ebata, Claude Dedonder-Lardeux, Christophe Juvet, and *Sotiris S. Xantheas
“The structure of the Calix[4]arene-(H₂O) cluster-*world's smallest cup of water*”
J. Phys. Chem. A. **114**(9), 2967-2972(2010)
- 2) Ryoji Kusaka, Satoshi Kokubu, Yoshiya Inokuchi, Takeharu Haino, and *Takayuki Ebata
“The Structure of host-guest complexes between dibenzo-18-crown-6 and water, ammonia, methanol, and acetylene - Evidence of Molecular Recognition on the Complexation - “
Phys. Chem. Chem. Phys., **13**, 6827-6836 (2011)

ほか 14 編

【総説】 1 編

【著書】 2 編

【分担執筆】 1 編

【国際会議発表】 12 件（うち Invited 7 件）

三枝洋之 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Hiroya Asami, Shu-hei Urashima, Aayka Motoda, Masaki Tsukamoto, Yoshihiro Hayakawa, *Hiroyuki Saigusa
“Controlling glycosyl-bond conformation of guanine nucleosides: Stabilization of the anti conformer in 5'-O-ethylguanosine”
J. Phys. Chem. Letters, **3**, 571-575 (2012).
- 2) Shu-hei Urashima, Hiroya Asami, Masashi Ohba, *Hiroyuki Saigusa
“Microhydration of the guanine-guanine and guanine-cytosine base pairs”
(Invited article) J. Phys. Chem A, **114**, 11231-11237 (2010).

ほか 5 編

【総説】 1 編

【国際会議発表】 10 件（うち Invited 2 件）

立川仁典 公募研究課題

【原著論文】

- 1) K. Suzuki, *M. Tachikawa, and M. Shiga,
“Efficient ab initio path integral hybrid Monte Carlo based on the fourth-order Trotter expansion: Application to fluoride ion-water cluster”,
J. Chem. Phys., **132**, 144108 (7pages) (2010).
- 2) T. Yoshikawa, S. Sugawara, *T. Takayanagi, M. Shiga, M. Tachikawa
“Quantum tautomerization in porphycene and its isotopomers: Path-integral molecular dynamics simulations”
Chem. Phys., **394**, 46-51 (2012).

ほか 59 編

【総説】 5 編

【著書】 1 編

【国際会議発表】 14 件（うち Invited 7 件）

松本剛昭 公募研究 (MATSUMOTO Yoshiteru Proposed Research Group)

【原著論文】

- 1) *Yoshiteru Matsumoto, Kenji Honma
“Crystalline structures in large ammonia clusters studied by IR cavity ringdown spectroscopy and a density functional theory calculation”
Chem. Phys. Lett. **490**, 9-13 (2010).
- 2) *Yoshiteru Matsumoto and Kenji Honma
“Hydrogen-bonded structures for self-aggregate of 2,5-dimethylpyrrole and its binary clusters with pyrrole studied by IR cavity ringdown spectroscopy”
Physical Chemistry Chemical Physics, **13**, 13962-13971 (2011).

ほか 4 編

【国際会議発表】 7 件（うち Invited 3 件）

古谷祐詞 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Yuji Furutani, Takeshi Murata and *Hideki Kandori,
“Sodium or Lithium Ion-Binding-Induced Structural Changes in the K-ring of V-ATPase from *Enterococcus hirae* Revealed by ATR-FTIR Spectroscopy”
J. Am. Chem. Soc. **133** (9), 2860-3 (2011)
- 2) Yuji Furutani, *Hideki Kandori, *Masaki Kawano, Koji Nakabayashi, Michito Yoshizawa and *Makoto Fujita
“In situ Spectroscopic, Electrochemical, and Theoretical Studies on the Photoinduced Host-Guest Electron Transfer that Precedes Unusual Host-mediated Alkane Photooxidation”
J. Am. Chem. Soc. **131** (13), 4764-8 (2009)

ほか 21 編

【総説】 5 編

【国際会議発表】 13 件（うち Invited 11 件）

大島康裕 公募研究課題

【原著論文】

- 1) K. Kitano, H. Hasegawa, and *Y. Ohshima
“Ultrafast angular-momentum orientation by linearly polarized laser fields”
Phys. Rev. Lett. **103**, 223003-1-4 (2009).
- 2) Hirokazu Hasegawa, *Yasuhiro Ohshima
“Quantum state reconstruction of a rotational wave packet created by a nonresonant intense femtosecond laser field”
Phys. Rev. Lett., **101**, 053002-1-4 (2008)

ほか 8 編

【総説】 3 編

【国際会議発表】 21 件（うち Invited 9 件）

鈴木正 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Hikaru Kuramochi, Takashi Kobayashi, *Tadashi Suzuki, Teijiro Ichimura
“Excited-State Dynamics of 6-Aza-2-thiothymine and 2-Thiothymine: Intersystem Crossing and Singlet Oxygen Photosensitization”
J. Phys. Chem. B **114** (26), 8782-8789 (2010).
- 2) Takashi Kobayashi, Yosuke Harada, Tadashi Suzuki, Teijiro Ichimura
“Excited State Characteristics of Aza-analogue of Uracil: Drastically Different Excited State

Dynamics of 6-Azauracil in Acetonitrile from Uracil"

J. Phys. Chem. A, 112, 13308–13315(2008).

ほか 6 編

【国際会議発表】 8 件

A02 班

田原太平 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Satoshi Takeuchi, Sanford Ruhman, Takao Tsuneda, Mahito Chiba, Tetsuya Taketsugu, *Tahei Tahara
"Spectroscopic tracking of structural evolution in ultrafast stilbene photoisomerization"
Science, **322**, 1073-1077 (2008).
- 2) Satoshi Nihonyanagi, Tatsuya Ishiyama, Touk-Kwan Lee, Shoichi Yamaguchi, Mischa Bonn, Akihiro Morita, *Tahei Tahara
"Unified Molecular View of Air/Water Interface Based on Experimental and Theoretical $\chi^{(2)}$ Spectra of Isotopically Diluted Water Surface"
J. Am. Chem. Soc. 133, 16875-16880 (2011)

ほか 44 編

【総説】 11 編

【分担執筆】 5 編

【国際会議発表】 75 件（うち Invited 45 件）

大西洋 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Takumi Hiasa, Kenjiro Kimura, Hiroshi Onishi
"Hydration of Hydrophilic Thiolate Monolayers Visualized by Atomic Force Microscopy" Physical Chemistry Chemical Physics, 14, 8419-8424(2012)

ほか 26 編

【総説】

- 1) 大西洋
"表面界面の分子科学"
Molecular Science, 5, A0045 (7 pages) (2011)

ほか 16 編

【分担執筆】 7 編

【国際会議発表】 74 件（うち Invited 19 件）

石橋孝章 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Tetsuhiko Nagahara, Takumi Suemasu, Misako Aida, *Taka-aki Ishibashi
"Self-Assembled Monolayers of Double-Chain Disulfides of Adenine on Au: An IR-UV Sum-Frequency Generation Spectroscopic Study"
Langmuir, **26**, 389-396 (2010).
- 2) Adchara Padermshoke, Shouta Konishi, Masato Ara, Hirokazu Tada, and *Taka-aki Ishibashi
"Novel SiO₂-deposited CaF₂ Substrate for Vibrational SFG Measurements of Chemisorbed Monolayers under Aqueous Environment"
Applied Spectroscopy, in press.

ほか 5 編

【総説】 2 編

【国際会議発表】 8 件（うち Invited 7 件）

藤野竜也 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Y. Minegishi, D. Morimoto, J. Matsumoto, H. Shiromaru, K. Hashimoto, *T. Fujino,
"Desorption Dynamics of Tetracene Ion from Tetracene-Doped Anthracene Crystals Studied by

- Femtosecond Time-Resolved Mass Spectrometry”, *J. Phys. Chem. C*, 116, 3059-3064 (2012).
- 2) Y. Komori, H. Shima, *T. Fujino, J. N. Kondo, K. Hashimoto, T. Korenaga, “Pronounced Selectivity in MALDI Mass Spectrometry with 2,4,6-Trihydroxyacetophenone on Zeolite Surface: Intensity Enhancement of Protonated Peptides and Suppression of Matrix-related Ions”, *J. Phys. Chem. C* 114, 1593 (2010).

ほか 9 編

【解説】 2 編

【分担執筆】 1 編

【著書】 1 編

【国際会議発表】 7 件（うち Invited 1 件）

山方啓 公募研究課題

【原著論文】

- 1) “Destruction of the hydration shell around tetraalkylammonium ions at the electrochemical interface”
*Akira Yamakata, Masatoshi Osawa,
J. Am. Chem. Soc. **131**, 6892-6893 (2009).
- 2) Akira Yamakata* Masaaki Yoshida, Jun Kubota, Masatoshi Osawa and Kazunari Domen
“Potential-dependent Recombination Kinetics of Photogenerated Electrons in n-type and p-type GaN Photoelectrodes Studied by Time-resolved IR Absorption Spectroscopy”
J. Am. Chem. Soc. **133**, 11351-11357 (2011).

ほか 12 編

【総説】 5 編

【分担執筆】 3 編

【国際会議発表】 15 件（うち Invited 6 件）

岡嶋孝治 公募研究課題

【原著論文】

- 1) A. Okada, Y. Mizutani, A. Subagyo, H. Hosoi, M. Nakamura, K. Sueoka, K. Kawahara, *T. Okajima
Direct observation of dynamic force propagation between focal adhesions of cells on microposts by atomic force microscopy
Appl. Phys. Lett. 99, 263703 (2011).
- 2) Y. Mizutani, K. Kawahara, T. Okajima*,
“Effect of Isoproterenol on Local Contractile Behaviors of Rat Cardiomyocytes Measured by Atomic Force Microscopy”
Current Pharmaceutical Biotechnology in press.

ほか 6 編

【総説】 1 編

【著書】 1 編

【国際会議発表】 17 件（うち Invited 1 件）

坂本章 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Akira Sakamoto, Osamu Nakamura, Mitsuo Tasumi
“Picosecond Time-Resolved Polarized Infrared Spectroscopic Study of Photoexcited States and Their Dynamics in Oriented Poly(*p*-phenylenevinylene)”
J. Phys. Chem. B., **112**, 16437 – 16444 (2008).
- 2) *A. Sakamoto, K. Mori, K. Imura, H. Okamoto
“Nanoscale Two-Photon Induced Polymerization of Diacetylene LB Film by Near-Field Photoirradiation”
J. Phys. Chem. C, **115**, 6190 – 6194 (2011).

ほか 5 編

【総説】 3 編

【分担執筆】 2 編

【国際会議発表】 7 件（うち Invited 1 件）

出羽毅久 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Ayumi Sumino, *Takehisa Dewa, Toshikazu Takeuchi, Ryuta Sugiura, Nobuaki Sasaki, Nobuo Misawa, Ryugo Tero, Tsuneo Urisu, Alastair T. Gardiner, Richard J. Cogdell, Hideki Hashimoto, *Mamoru Nango
“Construction and Structural Analysis of Tethered Lipid Bilayer Containing Photosynthetic Antenna Proteins for Functional Analysis”
Biomacromolecules, **12**, 2850-2858 (2011).
- 2) Masaharu Kondo, Kouji Iida, Takehisa Dewa, Hirofumi Tanaka, Takuji Ogawa, Sakiko Nagashima, Kenji V. P. Nagashima, Keizo Shimada, Hideki Hashimoto, Alastair T. Gardiner, Richard J. Cogdell, *Mamoru Nango
“Photocurrent and Electronic Activities of Oriented-His-tagged Photosynthetic Light-Harvesting/Reaction Centre Core Complexes Assembled onto a Gold Electrode”
Biomacromolecules, **13**, 432-438 (2012).

ほか 13 編

【分担執筆】 1 編

【国際会議発表】 17 件（うち Invited 1 件）

奥山弘 公募研究課題

【原著論文】

- 1) T. Kumagai, A. Shiotari, *H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, I. Hamada, T. Frederiksen and H. Ueba
“H-atom relay reactions in real space”
Nature Mater. **11**, 167-172 (2012).
- 2) A. Shiotari, Y. Kitaguchi, *H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga,
“Imaging covalent bonding between two NO molecules on Cu(110)”,
Phys. Rev. Lett. **106**, 156104/1-4 (2011).

ほか 5 編

【総説】 2 編

青木裕之 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Hiroyuki Aoki, Kazuki Mori, Shinzaburo Ito,
“Conformational Analysis of Single Polymer Chains in Three Dimensions by Super-resolution Fluorescence Microscopy”,
Soft Matter, **8**, 4390-4395 (2012).
- 2) Toru Ube, *Hiroyuki Aoki, Shinzaburo Ito, Jun-ichi Horinaka, Toshikazu Takigawa, Toshiro Masuda,
“Relaxation of Single Polymer Chain in Poly(methyl methacrylate) Films under Uniaxial Extension Observed by Scanning Near-field Optical Microscopy”,
Macromolecules, **44**, 4445-4451 (2011).

ほか 12 編

【総説】 4 編

【分担執筆】 4 編

【国際会議発表】 9 件

中野実 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *M. Nakano, M. Fukuda, T. Kudo, M. Miyazaki, Y. Wada, N. Matsuzaki, H. Endo, T. Handa
Static and Dynamic Properties of Phospholipid Bilayer Nanodiscs.
J. Am. Chem. Soc. **131**, 8308-8312 (2009).
- 2) M. Fukuda, *M. Nakano, M. Miyazaki, T. Handa
Thermodynamic and Kinetic Stability of Discoidal High-Density Lipoprotein Formation from Phosphatidylcholine/Apolipoprotein A-I Mixture.
J. Phys. Chem. B **114**, 8228-8234 (2010).

ほか 13 編

【総説】 4 編

【分担執筆】 1 編

【国際会議発表】 3 件 (うち Invited 2 件)

藤塚守 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Man Jae Park, *Mamoru Fujitsuka, Kiyohiko Kawai, *Tetsuro Majima
“Direct measurement of the dynamics of excess electron transfer through consecutive thymine sequence in DNA”
J. Am. Chem. Soc., **133**, 15320–15323 (2011).
- 2) *Mamoru Fujitsuka, Dae Won Cho, Hsin-Hau Huang, *Jye-Shane Yang, * Tetsuro Majima
“Structural relaxation in the singlet excited state of star-shaped oligofluorenes having a truxene or isotruxene as a core”
J. Phys. Chem. B, **115**, 13502–13507 (2011).

ほか 45 編

【総説】 4 編

【分担執筆】 5 編

【国際会議発表】 10 件 (うち Invited 5 件)

矢野陽子 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Yohko F. Yano, Tomoya Uruga, Hajime Tanida, Yasuko Terada and Hironari Yamada
"Protein Salting Out Observed at an Air-Water Interface "
J. Phys. Chem. letters, **2**, 995-999 (2011).
- 2) *Yohko F. Yano, Tomoya Uruga, Hajime Tanida, Hidenori Toyokawa, Yasuko Terada and Hironari Yamada
"Simultaneous measurement of X-ray specular reflection and off-specular diffuse scattering from liquid surfaces using a two-dimensional pixel array detector, the liquid-interface reflectometer of BL37XU at SPring-8"
J. Synchrotron Rad., **17**, 511-516 (2010).

【総説】 2 編

【国際会議発表】 1 件

玉井尚登 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Yoichi Kobayashi, Takatoshi Nishimura, Hiroshi Yamaguchi, and *Naoto Tamai
“Effect of Surface Defects on Auger Recombination in Colloidal CdS Quantum Dots”
J. Phys. Chem. Lett., **2**, 1051–1055 (2011).
- 2) Yoichi Kobayashi, Lingyun Pan, and *Naoto Tamai
“Effects of size and capping reagents on biexciton Auger recombination dynamics of CdTe quantum dots”
J. Phys. Chem. C, **113**, 11783–11789 (2009).

ほか 20 編

【総説】 2 編

【分担執筆】 2 編

【国際会議発表】 14 件 (うち Invited 2 件)

A03 班

水谷泰久 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Yuka Murakawa, Masako Nagai and *Yasuhisa Mizutani
"Differences between Protein Dynamics of Hemoglobin upon Dissociation of Oxygen and Carbon Monoxide"
J. Am. Chem. Soc., **134**, 1434-1437 (2012).
- 2) Misao Mizuno, Hironari Kamikubo, Mikio Kataoka and *Yasuhisa Mizutani
"Changes in the Hydrogen-Bond Network around the Chromophore of Photoactive Yellow Protein in the Ground and Excited States"
J. Phys. Chem. B, **115**, 9306–9310 (2011)

ほか 14 編

【総説】 6 編

【分担執筆】 1 編

【国際会議発表】 29 件（うち Invited 19 件）

加納英明 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Hiroki Segawa, Masanari Okuno, Hideaki Kano, Philippe Leproux, Vincent Couderc, and *Hiro-o Hamaguchi
"Label-free tetra-modal molecular imaging of living cells with CARS, SHG, THG and TSFG (coherent anti-Stokes Raman scattering, second harmonic generation, third harmonic generation and third-order sum frequency generation)"
Opt. Express **20**, 9551-9557 (2012).
- 2) Masanari Okuno, *Hideaki Kano, Philippe Leproux, Vincent Couderc, James Day, Mischa Bonn, and *Hiro-o Hamaguchi
"Quantitative CARS molecular fingerprinting of single living cells with the use of the maximum entropy method"
Angew. Chem. Int. Ed. **49**, 6773-6777 (2010).

ほか 10 編

【総説】 7 編

【分担執筆】 3 編

【国際会議発表】 5 件（うち Invited 4 件）

松下道雄 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Hiroyuki Oikawa, Satoru Fujiyoshi, Takehisa Dewa, Mamoru Nango, and *Michio Matsushita
"How deep is the potential well confining a protein in a specific conformation? A single-molecule study on temperature dependence of conformational change between 5 and 18 K"
J. Am. Chem. Soc. **130**, 4580-4581 (2008).
- 2) Daisuke Uchiyama, Hiroyuki Oikawa, Kohei Otomo, Mamoru Nango, Takehisa Dewa, Satoru Fujiyoshi, *Michio Matsushita
"Reconstitution of bacterial photosynthetic unit in a lipid bilayer studied by single-molecule spectroscopy at 5 K"
Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 11615 (2011).

ほか 7 編

【総説】 2 編

【国際会議発表】 5 件（うち Invited 2 件）

熊崎茂一 計画研究課題

【原著論文】

- 1) Makoto Hasegawa, Takashi Shiina, Masahide Terazima and *Shigeichi Kumazaki
"Selective Excitation of Photosystems in Chloroplasts inside Plant Leaves Observed by Near-Infrared Laser-Based Fluorescence Spectral Microscopy"

Plant Cell Physiol. **51**, 225 - 238 (2010).

- 2) Makoto Hasegawa, Takahiko Yoshida, Mitsunori Yabuta, Masahide Terazima, and *Shigeichi Kumazaki
“Anti-Stokes Fluorescence Spectra of Chloroplasts in *Parachlorella kessleri* and Maize at Room Temperature as Characterized by Near Infrared Continuous Wave Laser Fluorescence Microscopy and Absorption Microscopy”
J. Phys. Chem. B. **115**, 4184 – 4194 (2011)

ほか 1 編

- 【総説】 2 編
- 【分担執筆】 3 編
- 【国際会議発表】 3 件（うち Invited 1 件）

清水啓史 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Shigetoshi Oiki, Hirofumi Shimizu, Masayuki Iwamoto and Takashi Konno :
Single Molecular Gating Dynamics for the KcsA Potassium Channel.
Advances in Chemical Physics 146 147-194 (2011)

ほか 14 編

- 【総説】 3 編
- 【分担執筆】 1 編
- 【著書】 1 編
- 【国際会議発表】 9 件（うち Invited 3 件）

須藤雄気 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Yuki Sudo, Kunio Ihara, Shiori Kobayashi, Daisuke Suzuki, Hiroki Irieda, Takashi Kikukawa, Hideki Kandori, and Michio Homma
“A microbial rhodopsin with a unique retinal composition shows both sensory rhodopsin II and bacteriorhodopsin-like properties”
J. Biol. Chem. **286**, 5967-5976 (2011).
- 2) Daisuke Suzuki, Yuji Furutani, Keiichi Inoue, Takashi Kikukawa, Makoto Sakai, Masaaki Fujii, Hideki Kandori, Michio Homma, and *Yuki Sudo
“Effects of chloride ion binding on the photochemical properties of *Salinibacter* sensory rhodopsin I”
J. Mol. Biol. **392**, 48-62 (2009).

ほか 16 編

- 【総説】 9 編
- 【分担執筆】 1 編
- 【著書】 1 編
- 【国際会議発表】 4 件（うち Invite 4 件）

井上圭一 公募研究課題

【原著論文】

- 1) *Keiichi Inoue, Yuki Sudo, Michio Homma, Hideki Kandori
“Spectrally Silent Intermediates during the Photochemical Reactions of *Salinibacter* Sensory Rhodopsin I”
J. Phys. Chem. B **112**, 2542-2547 (2011).
- 2) Keiichi Inoue, Louisa Reissig, Makoto Sakai, Shiori Kobayashi, Michio Homma, Masaaki Fujii, Hideki Kandori, Yuki Sudo
“Absorption spectra and photochemical reactions in a unique photoactive protein, middle rhodopsin MR”
J. Phys. Chem. B **116**, 5888-5899 (2012).

ほか 2 編

- 【国際会議発表】 7 件（うち Invited 3 件）

佐藤啓文 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Kenji Iida, *Hirofumi Sato
“A two-dimensional-reference interaction site model theory for solvation structure near solid-liquid interface”
J. Chem. Phys. **135**, 244702 (2011).
- 2) Daisuke Yokogawa, Kohei Ono, *Hirofumi Sato, Shigeyoshi Sakaki
“Theoretical study on aquation reaction of cis-platin complex: RISM-SCF-SEDD, a hybrid approach of accurate quantum chemical method and statistical mechanics”
Dalton Trans. **40**, 11125-11130 (2011).

ほか 16 編

【国際会議発表】 6 件（うち Invited 1 件）

飯野亮太 公募研究課題

【原著論文】

- 1) #Takayuki Uchihashi, #Ryota Iino, *Toshio Ando, *Hiroyuki Noji (#Equal contribution)
“High-speed atomic force microscopy reveals rotary catalysis of rotorless F₁-ATPase”
Science. **333**, 755-758 (2011).
- 2) Rikiya Watanabe, Daichi Okuno, Shouichi Sakakihara, Katsuya Shimabukuro, Ryota Iino, Masasuke Yoshida, *Hiroyuki Noji
“Mechanical modulation of catalytic power on F₁-ATPase”
Nature Chemical Biology, **8**, 86-92 (2012).

ほか 10 編

【総説】 3 編

【分担執筆】 1 編

【国際会議発表】 9 件（うち Invited 3 件）

上久保裕生 公募研究課題

【原著論文】

- 1) S. Yamaguchi, H. Kamikubo, K. Kurihara, R. Kuroki, N. Niimura, N. Shimizu, Y. Yamazaki, M. Kataoka
“Low barrier hydrogen bond in photoactive yellow protein”
Proc. Natl. Acad. Sci. USA. **106**, 440-444 (2009)
- 2) N. A. Oktaviani, T. J. Pool, H. Kamikubo, J. Slager, R. M. Scek, M. Kataoka, F. A. A. Mulder
“Comprehensive determination of protein tyrosine pK_a values for photoactive yellow protein using indirect ¹³C NMR spectroscopy”
Biophys. J. **102**, 579-586 (2012)

ほか 6 編

【総説】 1 編

【国際会議発表】 8 件（うち Invited 2 件）

楯真一 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Shino Mizuno, Hirokazu Amida, Naohiro Kobayashi, *Shin-ichi Aizawa, *Shin-ichi Tate
“The NMR structure of FliK, the trigger for the switch of substrate specificity in the flagellar type III secretion apparatus.”
J. Mol. Biol., **409**, 558-573 (2011).
- 2) *Shin-ichi Tate.
“Anisotropic Nuclear Spin Interactions for the Morphology Analysis of Proteins in Solution by NMR Spectroscopy.”
Anal. Sci. **24**, 39-49 (2008).

ほか 13 編

【総説】 5 編

【著書】 1 編

【国際会議発表】 5件（うちInvited 2件）

小倉尚志 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Sachiko Yanagisawa, Keiko Yotsuya, Yumi Hashiwaki, Masaki Horitani, Hiroshi Sugimoto, Yoshitsugu Shiro, Evan H. Appelman and *Takashi Ogura
“Identification of the Fe-O₂ and the Fe=O Heme Species for Indoleamine 2, 3-Dioxygenase during Catalytic Turnover”
Chem. Lett., **39**, 36-37 (2010), selected as an EC (Editor’s Choice) Paper.
- 2) Ikemura, K., Mukai, M., Shimada, H., Tsukihara, T., Yamaguchi, S., Shinzawa-Itoh, K., Yoshikawa, S. and *Ogura, T.
“Red-Excitation Resonance Raman Analysis of the n_{Fe=O} Mode of Ferryl-Oxo Hemoproteins”
J. Am. Chem. Soc., **130**, 14384—14385 (2008).

ほか 32 編

【総説】 1 編

【国際会議発表】 10 件（うち Invited 6 件）

中迫雅由 公募研究課題

【原著論文】

- 1) Daisuke Matsuoka and *Masayoshi Nakasako
“Probability distributions of hydration water molecules around polar protein atoms obtained by a database analysis”
Journal of Physical Chemistry B, **113**, 11274-11292 (2009).
- 2) Daisuke Matsuoka, *Masayoshi Nakasako
“Prediction of hydration structures around hydrophilic surfaces of proteins by using the empirical hydration distribution functions from a database analysis”
J. Phys. Chem. B **114**, 4652–4663 (2010).

ほか 11 編

【総説】 4 編

【分担執筆】 1 編

【国際会議発表】 12 件（うち Invited 3 件）

○ 新聞発表 53 件

掲載日	氏名	班名	メディア名	見出し
2007.09.03	田原太平	A02	日経産業新聞	「混ざらない物質同士の界面 分子レベルで観察」
2007.09.03	田原太平	A02	日刊工業新聞	「水と油の界面観察 新レーザー分光法開発」
2007.09.03	田原太平	A02	化学工業日報	「界面のみ選択的観測 新レーザー分光法開発 分子構造解析に威力」
2008.08.25	中迫雅由	A03	日刊工業新聞	「植物の光感じる仕組み 分子レベルで解明」
2008.08.26	中迫雅由	A03	化学工業日報	「植物が光感じる分子機構 光受容ドメイン構造から」
2008.09.05	中迫雅由	A03	科学新聞	「植物青色光受容タンパク質フォトトロピンの構造解析」

2008.10.02	藤井正明	A01	日経産業新聞	「レーザープリンターから放出 ナノ粒子の影響探る 現状把握へ測定法検討」
2008.11.05	藤井正明	A01	日経産業新聞	「微粒子形成過程 1個単位で解析 東工大などが装置 イオンビーム断面に照射 物質分布を測定」
2008.11.14	竹内佐年、田原太平	A02	化学工業日報	「10兆分の1秒の分子の瞬間構造解明、理研」
2008.11.28	竹内佐年、田原太平	A02	科学新聞	「スチルベン異性化の様子-10兆分の1秒スケールで追跡」
2008.12.31	片岡幹雄、上久保裕生	A03	産経新聞	「特殊な水素結合を発見」
2009.01.05	片岡幹雄	A03	奈良日日新聞	「低障壁水素結合を発見」
2009.01.06	片岡幹雄	A03	日刊工業新聞	「高エネルギー水素結合：たんぱく質中の存在解明」
2009.01.06	片岡幹雄	A03	フジサンケイビジネスアイ	「タンパク質にも特殊な水素結合」
2009.01.16	片岡幹雄	A03	科学新聞	「低障壁水素結合：タンパク質で存在を証明」
2009.03.05	伊藤隆	A03	京都新聞	「生きた細胞内 タンパク質見えた」
2009.03.05	伊藤隆	A03	日刊工業新聞	「生きた細胞内観察 たんぱく質 原子レベル解析」
2009.03.05	伊藤隆	A03	読売新聞	「たんぱく質 生体内で観察」
2009.03.12	栗津邦男	A01	神戸新聞	「レーザーで胆石粉碎」
2009.03.13	栗津邦男	A01	日刊工業新聞	「赤外レーザーで胆石破碎」
2009.03.13	伊藤隆	A03	科学新聞	「生きた細胞内のタンパク質」
2009.04.03	伊藤隆	A03	読売新聞	「たんぱく質 生体内で観察」
2009.04.03	伊藤隆	A03	朝日新聞	「たんぱく質の構造を観察」
2009.04.13	米澤徹	A01	化学工業日報	「水分散性金・銀ナノ粒子」
2009.05.27	藤井正明	A01	日経産業新聞	「高機能顕微鏡 生きた細胞の分子観察」
2009.06.26	藤井正明	A01	科学新聞	「浮遊微粒子の履歴解析 環境汚染の発生源特定 東工大・藤井教授ら装置開発 ナノ、医療など幅広い応用に期待」
2009.07.14	須藤雄気	A03	時事通信	「緑色認識メカニズムを解明＝細菌使う実験で」
2009.07.15	須藤雄気	A03	朝日新聞	「目に緑映えるわけは」
2009.07.18	須藤雄気	A03	共同通信	「緑色識別の仕組み解明 細菌使い名古屋大チーム」
2009.07.19	須藤雄気	A03	中日新聞	「緑色識別 仕組み解明：名大グループ細菌で実験」
2009.07.24	須藤雄気	A03	科学新聞	「細菌『色認識』の仕組み解明」
2009.12.01	岡嶋孝治	A02	日経産業新聞	「細胞の硬さ 高精度測定」
2010.02.18	米澤徹	A01	日刊工業新聞	「金属ナノ粒子 容易に合成-水中プラズマ装置開発、北大 燃料電池用触媒に 応用」

2010.02.23	藤井正明	A01	日刊自動車新聞	「排ガスを詳細分析 東工大、トヤマなど 装置を製品化」
2010.03.26	藤井正明	A01	交通新聞	「自動車の排気ガス 有害成分を瞬時に検出 東工大などのチーム 移動型分析装置を公開 環境負荷軽減に期待」
2010.04.07	清水啓史	A03	日刊県民福井	福井大学医学部講師・清水啓史さんは、文部科学省が科学技術分野の研究開発などで顕著な功績のあった研究者に贈る文部科学大臣表彰の「若手科学者賞」を受賞。
2010.10.22	鈴木正	A01	日経産業新聞	「陽電子消滅、1日で計算 がんPET 高度化に利用」
2011.02.21	古谷 祐詞	A01	日刊工業新聞	「イオンと膜たんぱく質 結合部分特定で新手法」
2011.03.01	米澤徹	A01	日刊工業新聞	アリオス、白金触媒の高速生成技術を確認(代表者と共同で との記述あり)
2011.08.05	飯野亮太	A03	日経 BP ネット	「東大、たんぱく質ナノモーターの「回転の仕組み」を解明」
2011.08.05	飯野亮太	A03	北國新聞	「分子モーターの回転解明:独自の顕微鏡で金大チーム、ナノサイズの機器開発へ」
2011.08.08	飯野亮太	A03	マイコミジャーナル	「東大、回転子がなくてもたんぱく質ナノモーターが回転する仕組みを解明」
2011.08.08	飯野亮太	A03	朝日新聞(関西版)	「細胞内命のモーター見えた顕微鏡で金大」
2011.08.08	飯野亮太	A03	毎日新聞	「たんぱく質モーター金大、仕研究グループ」
2011.09.22	飯野亮太	A03	nature japan jobs 特集記事	「ATP 合成酵素を形成する F1 モーターの新たな回転のメカニズムを発見」
2011.09.29	田原太平	A02	日刊工業新聞	「水の表面構造を解明」
2011.09.30	田原太平	A02	日経産業新聞	「水面を形づくる水分子 並び方は不規則」
2011.10.28	米澤徹	A01	マイナビニュース、マイコミジャーナルなど	北大、真空でも蒸発せず生体との相性もよい「コリン様イオン液体」を開発
2011.11.07	米澤徹	A01	化学工業日報	「高親水性イオン液体合成 SEM 可視化剤応用へ」
2011.11.24	飯野亮太	A03	マイコミジャーナル	「東大、10nm の分子モーター F1-ATPase のエネルギー変換機構の謎を解明」
2011.12.02	飯野亮太	A03	科学新聞	「回転分子モーターのエネルギー変換機構ー東大・渡邊助教らの研究グループ解明ー」
2011.12.13	奥山弘	A02	京都新聞	「水素原子リレー 顕微鏡観察成功」
2012.03.12	坂本章	A02	日本経済新聞	「分子構造 最速で計測ー文化財修復に活用の装置」

○ 学術誌の表紙に掲載された論文 14 報

年	氏名	班名	学術誌名	題名等
2008	江幡孝之	A01	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , 10, 6238-6244	R. Kusaka, Y. Inokuchi, and *T. Ebata, "Structure of Hydrated Clusters of Dibenzo-18-crown-6-ether in a Supersonic Jet-encapsulation of Water Molecules in the Crown Cavity-"
2008	大橋和彦、 関谷博	A01	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , 10, 3052-3062	K. Inoue, K. Ohashi, T. Iino, J. Sasaki, K. Judai, N. Nishi, H. Sekiya, "Coordination Structures of the Silver Ion: Infrared Photodissociation Spectroscopy of $Ag^+(NH_3)_n$ ($n = 3-8$)"
2008	森田明弘	A02	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 10, 2010-2013	T. Miyamae, A. Morita, and Y. Ouchi, "First Acid Dissociation at an Aqueous H_2SO_4 Interface with Sum Frequency Generation Spectroscopy"
2008	森田明弘	A02	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 10, 5801-5816	A. Morita and T. Ishiyama, "Recent Progress in Theoretical Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy"
2008	中迫雅由	A03	<i>J. Mol. Biol.</i> 381, 718-733	M. Nakasako, K. Zikihara, D. Matsuoka, H. Katsura, S. Tokutomi, "Structural Basis of LOV1-dimerization of <i>Arabidopsis</i> Phototropin 1 and 2"
2008	米澤徹	A01	<i>Phys Chem Chem Phys</i> , 10, 6925-6927	T. Yonezawa, K. Uchida, Y. Yamanoi, *S. Horinouchi, N. Terasaki, and H. Nishihara, "Room-temperature Immobilization of Gold Nanoparticles on Si(111) Surface and Their Electron Behaviour"
2009	米澤徹	A01	<i>Anal. Sci.</i> , 25, 339-346	*T. Yonezawa, H. Kawasaki, A. Tarui, T. Watanabe, R. Arakawa, T. Shimada, and F. Mafune, "Detailed Consideration of Ability of Various Metal Nanoparticles for Surface-assisted Laser Desorption/ionization Mass Spectrometry"
2009	藤井朱鳥	A01	<i>J. Phys. Chem. A</i> 113, 12134	K. Mizuse, T. Hamashima, A. Fujii, "Infrared spectroscopy of phenol-(H_2O) $_n$: Structural strains in hydrogen bond networks of neutral water clusters."
2010	藤井朱鳥	A01	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 49, 4898	Y. Matsuda, A. Yamada, K. Hanaue, N. Mikami, A. Fujii, "Catalytic action of a single water molecule in a proton-migration reaction"
2010	大島康裕	A01	<i>Int. Rev. Phys. Chem.</i> 29, 619-663	Y. Ohshima and H. Hasegawa, "Coherent rotational excitation by intense nonresonant laser fields"
2010	佐藤啓文	A03	<i>J. Phys. Chem. B</i> , 114, 7935-7941	Kenji Hirano, Daisuke Yokogawa, Hirofumi Sato, Shigeyoshi Sakaki "An Analysis of 3D Solvation Structure in Biomolecules: Application to Coiled Coil Serine and Bacteriorhodopsin"
2011	藤塚守	A02	<i>The Journal of Physical Chemistry Letters</i> , Vol. 2, No. 23, pp. 2965-2971	Mamoru Fujitsuka and Tetsuro Majima, "Recent approach in radiation chemistry toward material and biological science"
2011	佐藤啓文	A03	<i>Dalton Trans.</i> 40, 11053-11053	Daisuke Yokogawa, Kohei Ono, Hirofumi Sato, Shigeyoshi Sakaki, "Theoretical study on aquation reaction of cis-platin complex: RISM-SCF-SEDD, a hybrid approach of accurate quantum chemical method and statistical mechanics"
2012	藤井朱鳥	A01	<i>Chem. Phys. Lett.</i> 537, 11-15	Asuka Fujii, Hiromasa Hayashi, Seiji Tsuzuki, "Preference of the monodentate contact in the CH/ π interaction between an alkyl group and a single phenyl ring: Stable structures of benzene-ethane clusters"

○ その他特記事項 33 件

年度	氏名	班名	学術誌名	題名等
2007	米澤徹	A01	東大理学部ニュース記事	質量分析を変える「ナノの花」の開発 米澤 徹 (化学専攻 准教授)
2007	田原太平、 山口祥一	A02	Laser Focus World Japan	液-液界面の選択的観測法開発に関する 研究成果が、日本語版 Laser Focus World 誌に掲載
2008	熊崎茂一	A03	Biophotonics International (Laurin Publishing, Berkshire Common)	2008年1月号に原著論文が紹介された。記事タイトル「New approaches to multicolor fluorescence imaging」
2008	須藤雄気、 神取秀樹	A03	Biochemistry	須藤および神取らによるセンサリーロドプシンに関する下記の論文が、5月のBiochemistry誌のHot Articleに選ばれた。 M. Ito, et al., "Steric Constraint in the Primary Photoproduct of Sensory Rhodopsin II Is a Prerequisite for Light-Signal Transfer to HtrII", Biochemistry., 47, 6208-6215
2008	竹内佐年、 田原太平	A02	Science	竹内らの研究 (Science 322, 1056 (2008)) が、Science 誌の Perspective に取り上げられた。
2008	竹内佐年、 田原太平	A02	Nature Chemistry	竹内らの研究 (Science 322, 1056 (2008)) が Nature Chemistry 誌の Research Highlight に取り上げられた。
2008	中野実	A02	日経サイエンス	中野実の研究内容が日経サイエンス誌の2008年12月号に紹介された。
2008	藤井 朱鳥	A01	Nature Chemistry	Angew. Chem. Int. Ed. 47, 6008-6010 (2008)に掲載の論文が Nature Chemistry 誌の Research Highlight に物理化学の最初の論文として取り上げられた。
2008	粟津邦男	A01	テレビ朝日系全国ネット	「近未来予測テレビ ジキル&ハイド、血管内のコレステロールの塊を除去する新しい治療法」、2008年10月5日放送
2008	米澤徹	A01	東大理学部ニュース記事	理学のキーワード 第18回「自己組織化」 米澤 徹 (化学専攻 准教授)
2008	清水啓史	A03	生理学会サイエンストピックス	研究内容を紹介 「チャネル分子のねじれがイオンの通り道を開閉する」
2008	中迫雅由	A03	SPring-8 Research Frontiers	Hot Topics M. Nakasako and S. Tokutomi Crystal Structure of LOV1 Domains in Arabidopsis Phototropin 1 and 2 SPring-8 Research Frontiers 2008 p32-33.
2009	坂本章	A02	NHK	埼玉大学 坂本 章准教授、(株)エス・ティ・ジャパン、国立歴史民俗博物館が共同開発した携帯型ラマンイメージング装置と、それを用いて行った浮世絵とその版木に関する研究成果が、NHKのテレビ番組で放送された。ゆうどきネットワーク「ゆうどきチェック ～浮世絵 よみがえる江戸の色彩～」2009年2月24日(火) NHK総合 16:50～18:00；ハイビジョン特集「幻の色よみがえる浮世絵」2009年4月12日(日) BShi 22:00～23:29；ワンダー×ワンダー「浮世絵 よみがえる幻の色」2009年5月16日(土) NHK総合 22:00～22:48

2009	粟津邦男	A01	月刊メディカルV	“レーザーで安全・低侵襲に胆石を微粉碎～動物実験に成功！” <i>ibid.</i> , 13 , 20-21 (2009).
2009	米澤徹	A01	Analytical Science	Analytical Science, Hot Article に選出される。 *T. Yonezawa, H. Kawasaki, A. Tarui, T. Watanabe, R. Arakawa, T. Shimada, and F. Mafune, "Detailed Investigation on Possibility of Nanoparticles of Various Metal Elements for Surface-Assisted Laser Desorption/ Ionization Mass Spectrometry", <i>Anal. Sci.</i> , 25 , 339-346 (2009).
2009	米澤徹	A01	東大理学部ニュース記事	焼結時に硫黄酸化物が出ない水分散性ナノ粒子 米澤徹（北海道大学大学院工学研究科材料科学専攻 教授）、西原寛（化学専攻 教授）
2009	中迫雅由、 松岳大輔	A03	Philip Ball 氏（英国サイ エンスライター） Blog	論文が、Philip Ball 博士のブログ(2009年9月29日)で紹介される。 http://waterinbiology.blogspot.jp/ Daisuke Matsuoka and *Masayoshi Nakasako “Probability distributions of hydration water molecules around polar protein atoms obtained by a database analysis” <i>Journal of Physical Chemistry B</i> , 113 , 11274-11292 (2009)
2010	大島康裕	A01	Molecular and Ionic Cluster Conference	H. Hasegawa and Yasuhiro Ohshima "Coherent excitation of intermolecular vibration in NO-Ar by a nonresonant intense femtosecond laser pulse" Molecular and Ionic Cluster Conference (Tohkamachi, Niigata, Japan, September 5-10, 2010) Selected as a "Hot Topic"
2010	山方啓	A02	Nature Chemistry	2010年5月7日号に“疎水界面に親水性・疎水性イオンが接近する際の水分子の構造変化を調べた研究成果（ <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 1 , 1487-1491, 2010）”が Research Highlights で紹介される。
2011	米澤徹	A01	北海道大学 工学部 広 報誌 えんじにあ Ring	No.389 (H24.1) 高度電子部品・触媒に用いられる新しいナノ粒子とそのグリーン合成法
2011	大島康裕	A01	The 31st International symposium on free radicals	H. Hasegawa and Yasuhiro Ohshima "Rotational and vibrational wave packets in NO and NO-Ar created by intense ultrashort laser pulse excitation" The 31st International symposium on free radicals (Rydges Sabaya Resort, Port Douglas, Australia, July 24-29, 2011) Selected as a "Hot Topic"
2011	出羽毅久	A02	e-J. Surf. Sci. Nanotech	Editor's choice (論文) A. Sumino, T. Dewa, N. Sasaki, N. Watanabe, M. Kondo, T. Morii, H. Hashimoto, M. Nango “Reconstitution and AFM Observation of Photosynthetic Membrane Protein Assembly in Planar Lipid Bilayers” <i>e-J. Surf. Sci. Nanotech.</i> 9 , 15-20 (2011).
2011	中迫雅由	A03	BS フジ	ガリレオ X 「加速器」最前線 宇宙・物質・生命現象の謎を解く 平成23年12月11日 AM 8:00~8:30 (再放送12月18日 AM 8:00~8:30)

2011	飯野亮太	A03	MRO北陸放送	「10億分の1メートル=ナノメートルを見る：金沢大学がたんぱく質を解明」 MRO北陸放送 情報6（ロック）エレスタ (2011年8月5日放送)
2011	飯野亮太	A03	NHK	「”酵素が回転”動画撮影に成功」 NHK ニュース、おはよう石川 (2011年8月5日放送)
2011	飯野亮太	A03	Science 他4誌	Uchihashi T, Iino R, Ando T, Noji H. High-speed atomic force microscopy reveals rotary catalysis of rotorless F1-ATPase. Science 2011. 333: 755-758. 上記論文が下記の解説記事で取り上げられた。 ・ Perspectives of "Science" ・ News of "Chemistry World" ・ Research Highlights of "Nature Nanotechnology" ・ News of "BioTechniques" ・ Minireview of "Cell"
2011	米澤徹	A01	Analytical Sciences	2011年に同誌で最も引用された論文に選定 Detailed Investigation on Possibility of Nanoparticles of Various Metal Elements for Surface-Assisted Laser Desorption/Ionization Mass Spectrometry Analytical Sciences, 2009, 25(3), 339
2012	米澤徹	A01	Hot Topic 高分子 (高分子学会)	(61, p. 396 (2012)) Improvement of the Application Force of Metal nanoparticles Using Polymers
2012	米澤徹	A01	北海道大学 工学部 広報誌 えんじにあ Ring	No.390 (H24.7刊行予定) ナノ粒子で未来を作る。エレクトロニクス・バイオ・触媒・安心安全
2012	鳥居肇	A01	J. Phys. Chem. Lett.	ナレーション付き slideshare presentation の作成・提出を当該誌編集長から依頼され公開中 "Mechanism of the Secondary Structure Dependence of the Infrared Intensity of the Amide II Mode of Peptide Chains" Hajime Torii, J. Phys. Chem. Lett. 2012, 3, 112-116
2012	酒井誠、藤井正明	A01	Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions Conference	Makoto Sakai and Masaaki Fujii, "Development of a super-resolving IR micro-spectroscopy and its application to biological cells", Isolated biomolecules and biomolecular interactions 2012 (Les Diablerets, Switzerland, January 22-27, 2012) Selected as a "Hot Topic"
2012	関谷博、藤井正明	A01	Angewandte Chemie International Edition	藤井グループと関谷グループの共同研究論文が Angewandte Chemie International Edition 誌の VIP (Very Important Paper) に選ばれる。同論文は同誌の内表紙にも選ばれた。 Tanabe, K., Miyazaki, M., Schmies, M., Patzer, A., Schütz, M., Sekiya, H., Sakai, M., Dopfer, O. and Fujii, M. (2012), Watching Water Migration around a Peptide Bond. Angew. Chem. Int. Ed
2012	関谷博、藤井正明	A01	ワイリー・ジャパン (出版社 Wiley の日本人) のブログ	ワイリー・ジャパンのブログ「ワイリー・サイエンスカフェ」で藤井グループと関谷グループの共同研究論文 "Watching Water Migration around a Peptide Bond"が紹介される。

○ 受賞 126 件

分子科学会賞、日本中性子学会賞、日本化学会学術賞 2 件、日本化学会進歩賞 2 件、分子科学会奨励賞、日本分光学会奨励賞 2 件、文部科学大臣表彰若手科学者賞、BCSJ 賞、日本物理学会若手奨励賞、日本薬学会奨励賞、高分子奨励賞、市村学術賞、堀場雅夫賞など

年月	受賞者氏名	班名	受賞した賞
2007 年 5 月	藤原亮正	A01	第 87 春季年会学生講演賞 , 日本化学会
2007 年 5 月	藤原亮正	A01	第 5 回大会若手優秀発表賞 , ナノ学会
2007 年 9 月	水瀬賢太	A01	第 1 回分子科学討論会 優秀ポスター賞
2007 年 9 月	迫田憲治	A01	第 1 回分子科学討論会 優秀講演賞
2007 年 10 月	山口惣太	A02	日本化学会第 1 回関東支部大会 優秀ポスター賞
2007 年 10 月	藤野竜也	A02	日本化学会第 1 回関東支部大会 優秀講演賞
2007 年 10 月	植原健	A01	日本分光学会顕微分光部会 優秀講演賞
2007 年 10 月	Sobhan Sen	A02	日本分光学会顕微分光部会 優秀発表賞
2007 年 11 月	井上和哉	A01	EMLG/JMLG Meeting2007 Poster Prize 受賞
2007 年 11 月	竹内佐年	A02	第 1 回分子科学会 奨励賞
2007 年 12 月	大西洋 他 3 名	A02	Paper Award of 17th International Photovoltaic Science and Engineering Conference
2008 年 3 月	加納英明	A03	日本化学会 進歩賞
2008 年 3 月	加納英明	A03	財団法人光科学技術研究振興財団 表彰
2008 年 3 月	田原太平	A02	平成 19 年度理化学研究所主任研究員会議 重要業績表彰(A)
2008 年 3 月	大西洋 他 1 名	A02	第 101 回触媒討論会 「注目の発表」
2008 年 3 月	鈴木机倫	A01	平成 20 年日本化学会春季年会 学生講演賞
2008 年 4 月	藤井正明	A01	新技術開発財団 市村学術賞貢献賞
2008 年 4 月	櫛引俊宏	A01	文部科学大臣表彰若手科学者賞
2008 年 5 月	青木裕之	A02	平成 19 年度高分子奨励賞
2008 年 6 月	水瀬賢太	A01	第 24 回化学反応討論会 ベストポスター賞
2008 年 7 月	青木裕之	A02	第 54 回高分子研究発表会(神戸)ヤングサイエンティスト講演賞
2008 年 8 月	竹内佐年	A02	平成 20 年度分子科学研究奨励 森野基金
2008 年 9 月	石橋孝章	A02	Society for Applied Spectroscopy、William F.Meggers 賞
2008 年 9 月	今村俊貴	A01	第 2 回分子科学討論会 優秀ポスター賞
2008 年 9 月	木村建次郎、 大西洋 他 1 名	A02	第 102 回触媒討論会 「注目の発表」
2008 年 9 月	内藤一也	A02	2008 年光化学討論会最優秀学生発表賞
2008 年 9 月	日下良二	A01	平成 20 年度分子科学会優秀ポスター賞
2008 年 9 月	日下良二	A01	第 2 回分子科学討論会 優秀講演賞
2008 年 11 月	木村建次郎 他 3 名	A02	日本表面科学会 技術賞
2008 年 11 月	野本知理	A02	日本分光学会 平成 20 年度年次講演会 若手講演賞
2008 年 11 月	石井克典	A01	第 29 回日本レーザー医学会 総会賞

2008年12月	清水啓史	A03	Institute for Protein Research Seminar, Osaka University, Gold Poster Award
2009年3月	藤芳暁	A03	日本物理学会 第3回若手奨励賞
2009年3月	藤芳暁、 松下道雄	A03	手島工業教育資金団 中村発明賞
2009年3月	石内俊一	A01	日本化学会 進歩賞
2009年3月	山口祥一	A02	平成20年度理化学研究所基幹研究所 研究奨励賞
2009年3月	中野実	A02	日本薬学会奨励賞
2009年3月	川鍋陽	A03	日本生物物理学会中部支部講演会 優秀発表賞
2009年3月	米澤徹 他6名	A01	Hot Article Award, Analytical Science
2009年3月	鈴木大介	A03	名古屋大学 GCOE 若手顕彰
2009年4月	斉田謙一郎	A01	九州大学 G-COE 未来分子システム科学 院生プロジェクト 発表会 優秀者
2009年5月	青木裕之	A02	Polymer Journal 論文賞-日本ゼオン賞
2009年5月	藤原亮正	A01	第57回質量分析総合討論会優秀ポスター賞
2009年5月	清水啓史	A03	(社)新化学発展協会、平成21年度研究奨励金受賞
2009年9月	今村俊貴	A01	第3回分子科学討論会 優秀ポスター賞
2009年9月	藤井直樹	A03	第3回分子科学討論会 優秀ポスター賞
2009年9月	野本知理 他3名	A02	分子科学会平成21年度優秀講演賞
2009年9月	木村建次郎 他7名	A02	分子科学会平成21年度優秀講演賞
2009年10月	山方啓	A02	日本分光学会 奨励賞
2009年10月	加納英明	A03	日本分光学会 奨励賞
2009年11月	小西翔大	A02	平成21年度日本分光学会年次講演会若手ポスター賞
2009年11月	山方啓	A02	日本分光学会奨励賞
2009年11月	小林洋一	A02	2009 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience, Excellent Poster Presentation Award
2010年1月	粉川良平	A02	7th International Workshop of Metal Oxide Surfaces (IWOX-VII) ポスター賞
2010年1月	山方啓	A02	日本化学会北海道支部奨励賞
2010年1月	粉川良平 他6名	A02	The 7th International Workshop on Oxide Surfaces (IWOX-VII) Poster Award
2010年3月	北幸海	A01	平成22年日本化学会春季年会 優秀講演賞
2010年3月	上脇準一	A03	2009年度 日本化学会支部長賞
2010年3月	矢野陽子	A02	第3回資生堂 女性研究者サイエンスグラント
2010年3月	須藤雄気	A03	財団法人光科学技術研究振興財団・平成21年度研究表彰
2010年3月	酒井誠	A01	日本化学会第24回若い世代の特別講演会表彰
2010年3月	清水啓史	A03	平成22年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞
2010年4月	橋本健朗	A01	IBM Faculty Award
2010年5月	北幸海	A01	日本コンピュータ化学会2010年春季年会 論文賞(吉田賞)
2010年5月	兵野篤	A01	第15回日本輸血・細胞治療学会学術奨励賞
2010年6月	石井克典 他3名	A01	平成21年度日本生体医工学会論文賞・阪本賞

2010年6月	前田晃宏	A02	第26回化学反応討論会ベストポスター賞
2010年6月	日下良二	A01	第26回化学反応討論会ベストポスター賞
2010年6月	大西洋	A02	(社)日本表面科学会フェロー
2010年6月	米澤徹	A01	Editor's Choice, Chem. Lett., 39, 548-549 (2010)
2010年7月	藤芳暁	A03	横浜理研・GSC 第1回七夕フェロー
2010年7月	原田諭	A01	第47回化学関連支部合同九州大会物理化学セッション 若手研究者奨励賞
2010年7月	池田貴将	A01	第47回化学関連支部合同九州大会物理化学セッション 若手研究者奨励賞
2010年8月	芝るみ	A03	The 4th Shanghai International Conference on Biophysics and Molecular Biology 優秀ポスター賞
2010年8月	日浅巧	A02	NC-AFM2010 Student Poster Award
2010年8月	藤芳暁	A03	平成22年度分子科学研究奨励森野基金の受給者
2010年8月	日浅巧 他9名	A02	13th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy (NC-AFM2010) Student Poster Award
2010年9月	志賀基之	A01	分子科学会 分子科学会奨励賞
2010年9月	富宅喜代一	A01	第2回(平成22年度)分子科学会賞
2010年9月	水瀬賢太	A01	第4回分子科学討論会 優秀講演賞
2010年9月	倉持光	A01	第4回分子科学討論会 分子科学会優秀ポスター賞
2010年9月	小林洋一	A02	第4回分子科学討論会優秀ポスター賞
2010年9月	城戸健太郎	A03	第4回分子科学討論会 2010 分子科学会優秀ポスター賞
2010年9月	飯田健二	A03	第4回分子科学討論会 2010 分子科学会優秀ポスター賞
2010年10月	日浅巧	A02	神戸大学理学研究科第1回サイエンスフロンティア研究会 優秀発表賞
2010年10月	水谷祐輔 他2名	A02	生体医工学会支部会学術奨励賞
2010年10月	土屋雅博 他2名	A02	生体医工学会支部会学術奨励賞
2010年10月	藤塚守 他5名	A02	Bulletin of Chemical Society of Japan, BCSJ 賞
2010年10月	日浅巧	A02	神戸大学理学研究科第1回サイエンスフロンティア研究会 優秀発表賞
2010年11月	志賀基之	A01	分子シミュレーション討論会 分子シミュレーション研究会 学術賞
2010年11月	小畑恵子	A02	テクノ愛2010 グランプリ
2011年6月	古橋幸嗣 他2名	A02	触媒学会西日本支部第2回触媒科学研究発表会優秀研究賞
2011年6月	米澤徹	A01	平成23年 高分子学会日立化成賞
2011年6月	倉持光	A01	第15回時間分解振動分光国際会議(TRVS XV) 最優秀ポ スター賞
2011年6月	古橋幸嗣 他3名	A02	触媒学会西日本支部第2回触媒科学研究発表会優秀研究賞
2011年1月	角野歩	A02	京都大学グローバル COE プログラム平成22年度年次報告会 ポスター賞
2011年3月	水瀬賢太	A01	平成22年度東北大学総長賞
2011年3月	吉村英敏	A01	大阪大学工業会賞
2011年3月	安東秀峰	A03	51st Sanibel symposium Superior Poster Award, USA
2011年3月	廣口典輝	A03	2010年度 日本化学会支部長賞

2011年8月	宇田川智史	A01	日本金属学会北海道支部サマーセッション 優秀ポスター賞
2011年9月	間久直 他5名	A01	第59回質量分析総合討論会ベストプレゼンテーション賞
2011年9月	峰岸佑樹	A02	日本分析化学会第60年会若手優秀講演賞
2011年9月	乙須拓洋	A02	第5回分子科学討論会 2011 優秀講演賞
2011年9月	日浅巧	A02	第5回分子科学討論会 2011 優秀講演賞
2011年9月	土井啓介	A01	第5回分子科学討論会 優秀ポスター賞
2011年9月	浅見祐也	A01	第5回分子科学討論会 2011 優秀講演賞
2011年9月	早木清吾	A03	第5回分子科学討論会 2011 分子科学会優秀ポスター賞
2011年9月	中野祥吾	A03	第84回 日本生化学会 鈴木紘一賞
2011年9月	日浅巧 他2名	A02	第5回分子科学討論会 2011 優秀講演賞
2011年10月	山口祥一	A02	2011 堀場雅夫賞
2011年11月	片岡幹雄	A03	日本中性子科学会賞
2011年11月	平松光太郎	A03	The Third Asian Spectroscopy Conference Best Poster Award (ポスター賞)
2011年11月	上久保裕生 他6名	A03	Best Poster Award in the 17th International Biophysics Congress
2011年11月	芝るみ 他7名	A03	Best Poster Award in the 17th International Biophysics Congress
2011年12月	吉水稔	A01	The Best Student Presentation Award@The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium
2011年12月	齊藤友里恵 他2名	A02	平成23年度 日本分光学会年次講演会 若手ポスター賞
2011年12月	久保稔	A03	日本分光学会年次講演会若手講演賞
2011年12月	石内俊一	A01	日本ナショナルインスツルメンツアプリケーションコンテスト2011 アカデミック-研究部門 部門賞
2012年2月	橋本健朗	A01	BCSJ Award
2012年2月	早木清吾	A03	52nd Sanibel Symposium Superior Poster Award, USA
2012年2月	田原太平	A02	日本化学会第29回学術賞
2012年2月	森田明弘	A02	日本化学会第29回学術賞
2012年3月	浅見祐也	A01	平成23年度横浜市立大学学長奨励賞
2012年3月	浅見祐也	A01	日本化学会第92春季年会学生講演賞
2012年3月	高橋知里	A02	日本薬学会 第132年会 学生優秀発表賞

(2) ホームページについて

本特定領域から広く情報発信するために和文と英文両方でホームページを作成し、領域の狙い、研究概要、研究項目、メンバーと組織、公開シンポジウム等のプログラムを公開している。また、毎月1号発行していたニューズレターを掲載し、業績、受賞、新聞掲載なども区分してアクセスできるようにした。なお、Google 検索での順位は、「高次系」1~4位、「高次分子系」1位、「分子科学」6位、「特定領域」4位、「特定領域研究」3位、「先端計測法」1位、「素過程的理解」1位、「Molecular Science Supra Functional Systems」1~4位、「Supra Functional Systems」1~4位、「Development of Advanced Methods for Exploring Elementary Process」4~7位であった。URLは以下の通りである。和文、英文のトップページをサンプルとして添付する。

文部科学省科学研究費補助金『特定領域研究』(平成19年度-23年度)

略称「高次系分子科学」領域番号「477」

分子高次系機能解明のための分子科学 — 先端計測法の開拓による素過程的理解

- ▶ HOME
- ▶ 研究概要
- ▶ 研究項目
- ▶ 研究組織
- ▶ メンバー
- ▶ 公開シンポジウム
- ▶ サイトマップ
- ▶ English
- ▶ 研究業績
- ▶ ニュースレター
- ▶ 受賞
- ▶ 新聞掲載等
- ▶ 班員からの発信など



「新しい計測法で分子運動のメカニズムを解き明かす」

生体に代表されるような現実の複雑な系では、多くの過程が分子レベルで協調的に運動することによって効率よく機能が発現しています。この研究領域では、分子科学とその関連分野で発達してきた先進的計測技術と分子に立脚した理解を融合し、“高次分子系”の理解を目指しています。

領域終了 - 終りと始まり

今年(平成24年)の東京の桜の開花は3月31日でしたが、この開花日を以て本特定領域研究を終了致します。「分子高次系機能解明のための分子科学 - 先端計測法の開拓による素過程的理解」(略称「高次系分子科学」、領域番号477)という長い正式名の領域ですが、中間評価を経て無事に全研究期間を全う出来ましたことは本領域の評価委員の先生方、関連領域の諸先生方の御指導、領域メンバー全員のたゆまぬご努力とご協力、そして関谷 A01 班長、田原 A02 班長、水谷 A03 班長の献身的なご努力のおかげと心より感謝申し上げます。 [続き>>](#)

成果公開シンポジウム

[詳細はこちら>>>](#)

特定領域研究「高次系分子科学」

成果公開シンポジウム 開催のお知らせ

- 【日時】 平成24年5月25日(金)~26日(土)
- 【会場】 東京工業大学すずかけ台キャンパス
H2 棟 すずかけホール3F 多目的ホール
http://www.titech.ac.jp/about/campus/s_map.html?id=01

ニュースレター 2012年3月号を公開しました

[詳細はこちら>>>](#)

【業績紹介】

トリペプチドの気相分光：C-末端のアミドキャップが2次構造に与える影響を解明
ピコ秒赤外-紫外二重共鳴法によるサイト選別したベンゼンクラスターの振動緩和の研究
コールドトラップで冷却した気相[アルカリ金属イオン-1,2ジメトキシベンゼン]錯体の紫外・赤外レーザー分光

【受賞】

理化学研究所・田原太平主任研究員が「日本化学会第29回学術賞」を受賞
東北大学・森田明弘教授が「日本化学会第29回学術賞」を受賞

「高次系分子科学」ホームページ更新履歴

- 2012.04.25 成果公開シンポジウムのお知らせを掲載しました。
- 2012.04.05 ニュースレター 3月号を追加しました。
- 2012.02.29 ニュースレター 2月号を追加しました。

[過去の更新履歴はこちら>>](#)

<<お問い合わせ>> 「高次系分子科学」事務担当者 koujikei@csd.res.titech.ac.jp

Copyright © 2007-2012 Molecular Science for Supra-Functional Systems. All rights reserved.

Area Number 477; "Molecular Science for Supra Functional Systems"
"Molecular Science for Supra Functional Systems — Development of
Advanced Methods for Exploring Elementary Process"
from the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT), Japan.

- ▶ HOME
- ▶ Project Scheme
- ▶ Project Team
- ▶ Organization
- ▶ Members
- ▶ Symposium
- ▶ Site Map
- ▶ Japanese



Molecular systems in the real world, including biological systems, often show ultimate-performance by synchronizing various molecular processes harmonically. This project aims to understand such "supra functional molecular systems" by combining advanced methodology and analysis that have been developed in molecular science. We organize an active team of excellent researchers in different research fields of the gas phase cluster, condensed phase, and biomolecular science that have developed individually. Intensive collaborations and development of new measurement methods for supra functional systems will reveal the essence of supra functional systems, and will open new horizons in molecular science. This research will provide both scientific basis and new research technique for various related fields such as life science, material science, and nanoscience.

News

- | | |
|-------------------|---|
| May 16, 2011 | The 5th symposium's information had been added. |
| December 21, 2009 | Symposium's information had been added. |
| April 16, 2009 | The 3rd symposium's information had been added. |
| July 02, 2008 | Proposed Research Subjects and Team members had been added. |
| October 11, 2007 | The 1st symposium was finished. |

(3) 公開発表について

公開シンポジウム (うち国際シンポジウム)	6回 (2回)
合同班会議	6回
ミニ公開シンポジウム (うち国際シンポジウム)	16回 (2回)

1) 公開シンポジウム (国際シンポジウム) 概要

<第1回>平成19年10月6日(土)

場所：ベルサール九段(東京・九段)

プログラム：計画班班長3名からの概要説明及び計画班班員3名の講演

参加者：117名

<第2回>平成20年11月10日(月)-11日(火)

場所：大阪大学コンベンションセンター(大阪・吹田市)

プログラム：研究課題代表者21名の講演、研究課題代表者全員47名

及び研究分担・連携研究者等23名によるポスター発表

参加者：100名

<第3回>平成21年6月3日(水)-5日(金)*国際シンポジウム

場所：東京工業大学デジタル多目的ホール(東京・大岡山)

プログラム：研究課題代表者24名の講演、外国人評価委員5名の招待講演、研究課題代表者3名のショートトーク(外国人評価委員1名が来日できなくなったため急遽実施)、研究課題代表者全員45名及び研究分担・連携研究者等27名によるポスター発表

参加者：134名

<第4回>平成22年11月25日(木)-26日(金)

場所：東北大学片平さくらホール(宮城・仙台市)

プログラム：研究課題代表者21名の講演、研究課題代表者全員44名

及び研究分担・連携研究者等23名によるポスター発表

参加者：107名

<第5回>平成23年7月11日(月)-13日(水)*国際シンポジウム

場所：ロイトン札幌(北海道・札幌市)

プログラム：研究課題代表者15名の講演、外国人評価委員7名の招待講演、研究課題代表者全員42名及び研究分担・連携研究者等29名によるポスター発表

参加数：100名

<成果公開シンポジウム>平成24年5月25日(金)-26日(土)

場所：東京工業大学すずかけホール(神奈川・横浜市)

プログラム：研究課題代表者15名の講演、研究課題代表者全員42名及び研究分担・連携研究者等14名によるポスター発表

参加数：108名

2) 合同班会議概要

<第1回>平成19年10月6日(土)

場所：ベルサール九段(東京・九段)

プログラム：第一回公開シンポジウムに先立つ合同班会議であり、計画班員の簡単な研究紹介、領域のねらいの確認、今後の進め方などについて討論した。

参加者：26名

<第2回>平成19年11月29日(木)-30日(金)

場所：唐津ロイヤルホテル(佐賀・唐津)

プログラム：研究課題代表者6名の講演、計画研究課題代表者全員13名及び研究分担・連携研究者等32名によるポスター発表

参加者：63名

<第3回>平成20年5月27日(火)-29日(木)

場所：当間高原リゾートベルナティオ(新潟・十日町市)

プログラム：公募研究課題代表者15名の講演、
計画・公募研究課題代表者全員47名及び研究分担・連携研究者等24名によるポスター発表

参加者：99名

<第4回>平成21年11月26日(木)-28日(土)

場所：別府湾ロイヤルホテル(大分・速見)

プログラム：研究課題代表者10名の講演、評価委員他3名の招待講演、
計画・公募研究課題代表者全員45名及び研究分担・連携研究者等35名によるポスター発表

参加者：96名

<第5回>平成22年5月24日(月)-26日(水)

場所：南淡路ロイヤルホテル(兵庫・南淡路)

プログラム：公募研究課題代表者15名の講演、
計画・公募研究課題代表者全員44名及び研究分担・連携研究者等19名によるポスター発表

参加者：92名

<第6回>平成23年12月8日(木)-10日(土)

場所：南淡路ロイヤルホテル(兵庫・南淡路)

プログラム：公募研究課題代表者15名の講演、
計画・公募研究課題代表者全員42名及び研究分担・連携研究者等30名によるポスター発表

参加者：88名

3) ミニ公開シンポジウム概要

<第1回>「生体分子の蒸発法と気相分光」

平成20年3月18日(火)

場所：大阪大学吹田キャンパス・银杏会館三和ホール(大阪・吹田市)

プログラム：招待講演1件、依頼講演2件、若手講演1件、総合討論

参加者：29名

<第2回>「イオンチャンネルの構造ダイナミクス」

平成20年7月8日(火)-9日(水)

場所：7月8日：AOSSA 501 会議室(福井・福井市)

7月9日：福井大学医学部松岡キャンパス3階会議室

プログラム：依頼講演1件、計画・公募研究課題代表者9名による講演、総合討論

参加者：40名

<第3回>「クラスター化学の新展開—凝縮相との接点」

平成20年7月12日(土)

場所：神戸大学六甲台キャンパス瀧川記念学術交流会館(兵庫・神戸市)

プログラム：依頼講演4件、総合討論

参加者：26名

<第4回>「プロトンポンプを考える」

平成20年8月6日(水)

場所：大阪大学豊中キャンパス 待兼山会館 会議室(大阪・豊中市)

プログラム：依頼講演1件、公募研究課題代表者4名による講演、総合討論

参加者：30名

<第5回>「レーザー脱離/イオン化法の検証～分子振動励起とプロトン移動～」

平成20年10月10日(金)

場所：大阪大学吹田キャンパス GSE コモンイースト会議室1(大阪・吹田市)

プログラム：招待講演1件、依頼講演2件、若手講演1件、総合討論

参加者：19名

<第6回>「表面・界面を観る非線形分光の新しい展開」

平成21年3月23日(月)-24日(火)

場所：理化学研究所鈴木梅太郎記念ホール(埼玉・和光市)

プログラム：講演14件、及びポスター発表15件

参加者：55名

<第7回>「イオンチャンネルの構造ダイナミクスII」

平成21年8月31日(月)-9月1日(火)

場所：越前町生涯学習センター越前分館(福井・丹生郡)

プログラム：講演11件

参加者：22名

<第8回>「Development of Advanced Methods for Exploring Elementary Processes」

平成22年1月15日(金)

*国際シンポジウム

場所：東京工業大学すずかけ台キャンパス J2棟 20階 中会議室

プログラム：講演8件

参加者：34名

<第9回>「イオンチャンネル KcsA の機能制御と構造変化の関係を解明する計測法」

平成22年8月30日(月)-31日(火)

場所：サギセミナーセンター(広島・佐木島)

プログラム：講演10件

参加者：19名

<第10回>「核形成の学理と応用」*国際シンポジウム

平成22年9月4日(土)

場所：首都大学東京南大沢キャンパス国際交流会館(東京・南大沢)

プログラム：講演4件

参加者：40名

<第11回>「若手の会」

平成 22 年 11 月 26 日（金）-27 日（土）
場所：ホテルニュー 水戸屋(宮城・秋保町)
プログラム：講演 6 件
参加者：28 名

<第 12 回> 「光受容タンパク質」
平成 23 年 10 月 26 日（水）-27（木）
場所：三谷温泉 松風園（愛知・蒲郡市）
プログラム：講演 15 件
参加者：23 名

<第 13 回> 「先端的レーザー分光の若手シンポジウム」
平成 23 年 12 月 17 日（金）
場所：横浜市立大学カメラホール（神奈川・横浜市）
プログラム：講演 8 件
参加者：60 名

<第 14 回> 「低温科学と高次系分子科学」
平成 24 年 1 月 16 日（月）-17 日（火）
場所：北海道大学低温化学研究所講堂（北海道・札幌市）
プログラム：講演 15 件
参加者：25 名

<第 15 回> 「イオンチャネル研究の現状とこれからについて考える」
平成 24 年 1 月 23 日（月）-24 日（火）
場所：大阪大学会館会議室（大阪・豊中市）
プログラム：講演 10 件
参加者：17 名

<第 16 回>
平成 24 年 3 月 10 日（土）-11 日（日）
場所：東北大学工学研究科青葉記念会館（宮城・仙台市）
プログラム：講演 15 件
参加者：45 名

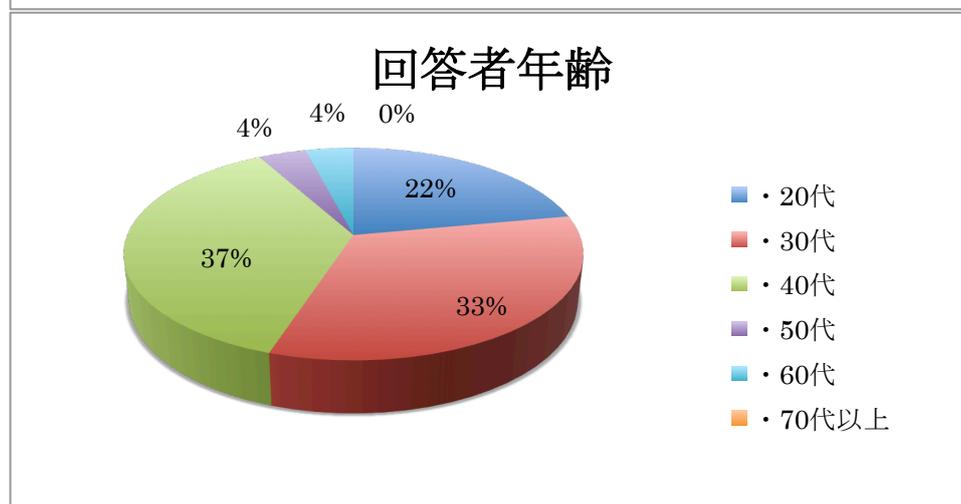
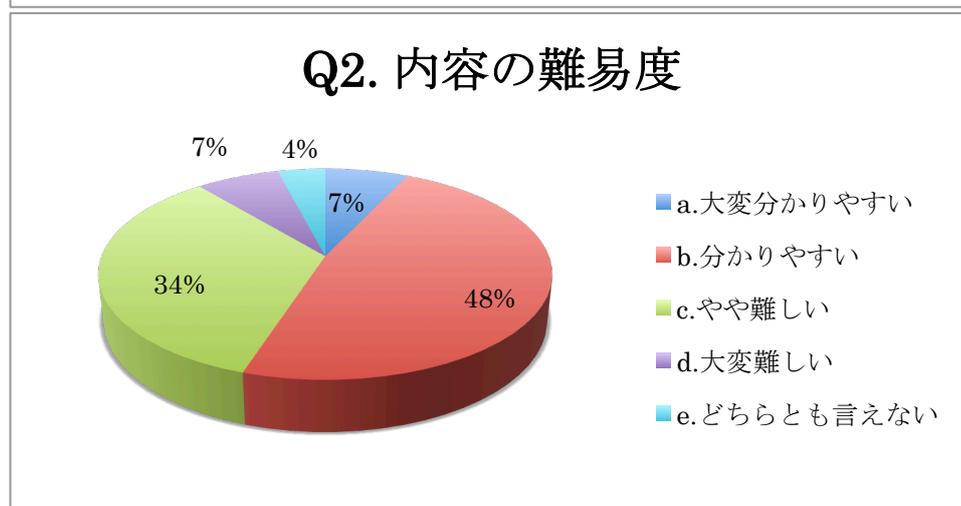
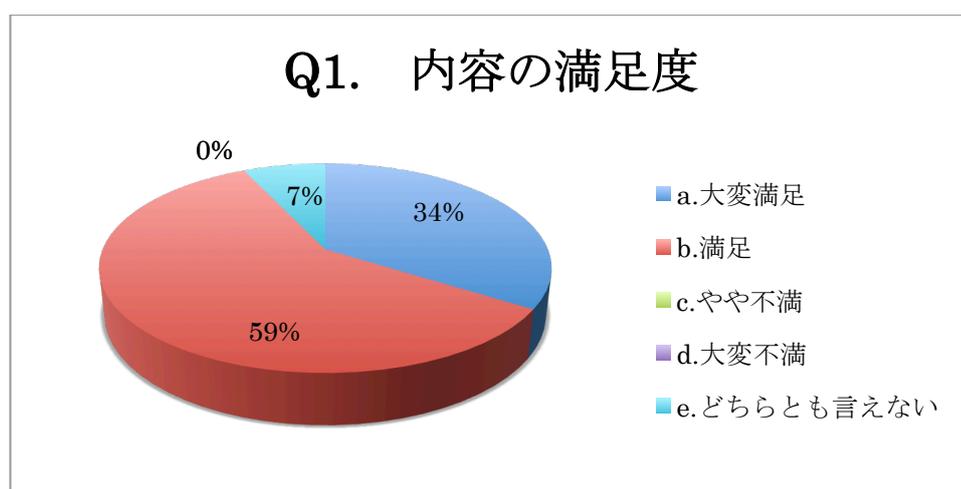
(4) 「国民と科学・技術対話」について

○ 公開シンポジウムでのアンケート結果のまとめ

実 施 : 第4回公開シンポジウム (平成22年11月25-26日)

場 所 : 東北大学片平さくらホール

参加者数 : 105名 (男性102名、女性3名)



7. 研究組織と各研究項目の連携状況

研究組織

総括班：

代表者氏名	総括班における役割
(研究代表者) 藤井 正明 (東京工業大学・教授) (研究分担者) 関谷 博 (九州大学・教授) 田原 太平 (理化学研究所・主任研究員) 水谷 泰久 (大阪大学・教授)	特定領域研究・総括班の統括・A01 項目の研究推進および事務担当 A01 項目の研究推進と統括および共同研究の推進 A02 項目の研究推進と統括および広報担当 A03 項目の研究推進と統括および連絡担当
(研究協力者・国内評価委員) 茅 幸二 (理化学研究所) 北川 禎三 (兵庫県立大学大学院) 吉原 経太郎 (首都大学東京) 中村 宏樹 (台湾・國立交通大學) 濱口 宏夫 (東京大学) 増原 宏 (奈良先端科学技術大学院大学)	成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言
(研究協力者・外国人評価委員) K. Müller-Dethlefs (英) S. K. Kim (韓) K. Bhattacharyya (印) G. C. Walker (加) P. M. Champion (米) S. Ruhman (イスラエル) C. Jovet (仏) C. Dedonder-Lardeux (仏)	成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言 成果の評価と内容への助言
(研究協力者・班友) *H24年3月領域終了時点 佃 達哉 (北海道大学・教授) 美齊津 文典 (東北大学・教授) 三井 正明 (静岡大学・准教授) 野々瀬 真司 (横浜市立大学・准教授) 八木 清 (イリノイ大学・客員助教) 岩田 耕一 (学習院大学・教授) 太田 薫 (神戸大学・講師) 平松 弘嗣 (東北大学・助教) 高橋 聡 (東北大学・教授) 神取 秀樹 (名古屋工業大学・教授) 片岡 幹雄 (奈良先端科学技術大学院大学・教授) 城地 保昌 (理化学研究所・研究員) 城 宜嗣 (理化学研究所・主任研究員) 宇和田 貴之 (台湾・國立交通大學・助理研究員) 伊藤 隆 (首都大学東京・教授)	A01 班の研究への協力と助言 A01 班の研究への協力と助言 A01 班の研究への協力と助言 A01 班の研究への協力と助言 A02 班の研究への協力と助言 A02 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言 A03 班の研究への協力と助言

A01 分子高次系：

計画研究	研究課題名 (H19-23)	クラスター内プロトン・電荷移動ダイナミクス—凝縮相との違いは何に起因するか		
	研究代表者	関谷 博	九州大学・大学院理学研究院	教授
	研究分担者	大橋 和彦	九州大学・大学院理学研究院	准教授
	研究分担者	迫田 憲治	九州大学・大学院理学研究院	助教
計画研究	研究課題名 (H19-23)	大サイズクラスターの赤外分光によるアミノ酸の大規模水和構造の研究		
	研究代表者	藤井 朱鳥	東北大学・大学院理学研究科	准教授

計画研究	研究課題名 (H19-23)	分子クラスターから細胞に至る分子認識系の光励起ダイナミクスと素過程 解明		
	研究代表者	藤井 正明	東京工業大学・ソリューション 研究機構/資源化学研究所	教授
	研究分担者	酒井 誠	東京工業大学・資源化学研究所	准教授
	研究分担者	石内 俊一	東京工業大学・資源化学研究所	助教
	研究分担者	橋本 健朗	首都大学東京・理工学研究科	准教授
計画研究	研究課題名 (H19-23)	低エネルギーフォトンによる生体分子の修飾・代謝の計測		
	研究代表者	栗津 邦男	大阪大学・大学院工学研究科	教授
	研究分担者	間 久直	大阪大学・大学院工学研究科	助教
	研究分担者	石井 克典	大阪大学・大学院工学研究科	助教
計画研究	研究課題名 (H19-23)	気相溶媒和金属イオンの温度可変分光解析装置の開発と生体分子への応用		
	研究代表者	富宅 喜代一	神戸大学・理学研究科	名誉教授
	研究分担者	石川 春樹	神戸大学・理学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	生体機能分子の非分解イオン化のための無機ナノ構造体 LDI 基板の設計と 構築		
	研究課題名 (H22-23)	生体関連物質のソフトイオン化を目指すナノ LDI-MS 基 板の開発とメカ ニズム解明		
	研究代表者	米澤 徹	北海道大学・大学院工学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	酸化還元反応のマトリックス単離		
	研究課題名 (H22-23)	生体分子-水錯体の構造と光反応性		
	研究代表者	赤井 伸行	東京工業大学・大学院理工学研究科	助教
公募研究	研究課題名 (H22-23)	分子間相互作用に由来する振動バンドの強度と形状の変化を理解するための 解析法理論		
	研究分担者	鳥居 肇	静岡大学教育学部	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	超音速分子線レーザー分光による包接化合物の分子取り込み機構の解明		
	研究課題名 (H22-23)	ピコ秒赤外-紫外二重共鳴法によるサイト選別したベンゼンクラスターの振 動緩和の研究		
	研究代表者	江幡 孝之	広島大学・大学院理学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	レーザー脱離法を用いた生体分子高次系の気相孤立化		
	研究課題名 (H22-23)	レーザー脱離法による生体分子高次構造の生成と赤外振動スペクトルによる 構造解析		
	研究代表者	三枝 洋之	横浜市立大学・生命ナノシステム科学 研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	量子ゆらぎと熱ゆらぎを考慮した高次系生体分子クラスターの分子論的解明		
	研究課題名 (H22-23)	量子・熱ゆらぎを考慮した生体分子高次系クラスターの理論的解明		
	研究代表者	立川 仁典	横浜市立大学・生命ナノシステム科学 研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	交差ジェット-赤外分光による巨大サイズ水クラスターの水素結合構造と揺 らぎの研究		
	研究課題名 (H22-23)	交差ジェット-赤外分光による水とクラスターの水素結合構造と揺らぎの研 究		
	研究代表者	松本 剛昭	兵庫県立大学・大学院物質理学研究科	助教
公募研究	研究課題名 (H20-21)	孤立ナノ空間に形成された水クラスターの水素結合ダイナミクス解析		
	研究課題名 (H22-23)	孤立ナノ空間を有する有機金属錯体での特異な光化学反応の分光解析		
	研究代表者	古谷 祐詞	分子科学研究所・生命・錯体分子科学 研究領域	准教授

公募研究	研究課題名 (H20-23)	非線形コヒーレント分光による分子間相互作用の精密決定		
	研究代表者	大島 康裕	分子科学研究所・光分子科学研究領域	教授
公募研究	研究課題名 (H22-23)	超音速ジェット法によるアザ置換核酸塩基の励起状態		
	研究代表者	鈴木 正	青山学院大学・理工学部	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	振動ダイナミクスの新しい理論と水素結合系への応用		
	研究課題名 (H22)	非調和振動理論の新しい展開・水素結合クラスターへの応用		
	研究代表者	八木 清	山梨大学燃料電池ナノ材料研究センター	助教
公募研究	研究課題名 (H20-21)	機能性有機分子の低次元 π 電子ナノネットワーク構造の生成と評価		
	研究代表者	三井 正明	静岡大学・理学部	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	生体分子クラスターの衝突反応に関する研究		
	研究代表者	野々瀬 真司	横浜市立大学・国際総合科学部	准教授

A02 複合高次系：

計画研究	研究課題名 (H19-23)	極限的分光計測による複雑系高次分子機能の研究		
	研究代表者	田原 太平	理化学研究所・田原分子分光研究室	主任研究員
	研究分担者	竹内 佐年	理化学研究所・田原分子分光研究室	専任研究員
	研究分担者	山口 祥一	理化学研究所・田原分子分光研究室	専任研究員
	研究分担者	石井 邦彦	理化学研究所・田原分子分光研究室	研究員
	研究分担者	細井 晴子	東邦大学・理学部生物分子科学科	講師
	研究分担者	森田 明弘	東北大学・理学研究科	教授
計画研究	研究課題名 (H19-23)	走査プローブ顕微鏡を用いた分子系高次機能の研究		
	研究代表者	大西 洋	神戸大学・理学研究科	教授
	研究分担者	木村 建次郎	神戸大学・理学研究科	講師
計画研究	研究課題名 (H19-23)	SFG 分光法による有機および生体分子膜界面の電子振動状態の研究		
	研究代表者	石橋 孝章	広島大学・大学院理学研究科	准教授
計画研究	研究課題名 (H19-23)	時間分解分光法を用いた非解離イオン化質量分析機構の研究		
	研究代表者	藤野 竜也	首都大学東京・大学院理工学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	固液界面における準束縛溶媒分子の配向緩和ダイナミクス		
	研究課題名 (H22-23)	電極界面におけるイオンの水和構造ダイナミクス		
	研究代表者	山方 啓	豊田工業大学・大学院工学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	走査プローブ顕微鏡と蛍光相関分光法による生細胞界面の1分子ダイナミクスの研究		
	研究課題名 (H22-23)	細胞周期制御下の細胞界面ナノダイナミクスの研究		
	研究代表者	岡嶋 孝治	北海道大学・情報科学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-23)	近赤外光励起ピコ秒時間分解ラマン分光法による機能性分子・高分子・生体分子の研究		
	研究代表者	坂本 章	埼玉大学・大学院理工学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H22-23)	顕微鏡-電流同時計測による光合成膜タンパク質超分子集合系の機能解明		
	研究代表者	出羽 毅久	名古屋工業大学・工学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H22-23)	協奏的プロトンダイナミクスの実空間観測		
	研究代表者	奥山 弘	京都大学・大学院理学研究科	准教授

公募研究	研究課題名 (H20-21)	近接場光学顕微鏡による表面・界面における単一高分子鎖の構造ダイナミクス		
	研究課題名 (H22-23)	近接場単一分子分光によって明らかにする表面・界面における高分子鎖の物性		
	研究代表者	青木 裕之	京都大学・先端医工学研究ユニット	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	時間分解蛍光・中性子小角散乱法を用いた膜脂質ダイナミクスの制御メカニズムの解明		
	研究課題名 (H22-23)	時間分解蛍光・中性子散乱法を用いたナノディスクの構造転移と脂質ダイナミクスの研究		
	研究代表者	中野 実	京都大学・薬学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	高分子鎖内光誘起高速過程の解明		
	研究課題名 (H22-23)	高分子鎖内の電荷および励起エネルギー非局在過程の検討		
	研究代表者	藤塚 守	大阪大学・産業科学研究所	准教授
公募研究	研究課題名 (H22-23)	X線鏡面/非鏡面反射同時計測による界面と相互作用する生体分子の面外内構造解析		
	研究代表者	矢野 陽子	近畿大学・理工学部	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	界面機能の単一分子分光とフェムト秒近赤外分光による研究		
	研究課題名 (H22-23)	電子をプローブとする界面機能の単一微粒子分光とフェムト秒近赤外分光による研究		
	研究代表者	玉井 尚登	関西学院大学・理工学部	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	分子シミュレーションに基づく和周波発生の理論の深化		
	研究代表者	森田 明弘	東北大学・大学院理学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	光エネルギー変換機能をもつタンパク質超分子複合体の電極上での組織化と機能解析		
	研究代表者	南後 守	名古屋工業大学・大学院工学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	新規2次元赤外分光法による複雑分子高次系での構造揺らぎの実時間計測		
	研究代表者	太田 薫	神戸大学・分子フォトサイエンス研究センター	非常勤講師
公募研究	研究課題名 (H20-21)	二中心複合分子系の高次光機能の解明		
	研究代表者	浅野 素子	首都大学東京・大学院理工学研究科	准教授

A03 生体高次系：

計画研究	研究課題名 (H19-23)	時間分解共鳴ラマン分光法によるタンパク質アロステリック機構の動的構造基盤の解明		
	研究代表者	水谷 泰久	大阪大学・大学院理学研究科	教授
	研究分担者	石川 春人	大阪大学・大学院理学研究科	講師
	研究分担者	水野 操	大阪大学・大学院理学研究科	助教
計画研究	研究課題名 (H19-23)	白色レーザーを用いた細胞内生体分子の動的多光子分光イメージング		
	研究代表者	加納 英明	筑波大学・数理物質系	准教授
計画研究	研究課題名 (H19-23)	液体ヘリウム温度での単一分子分光による酵素の構造・機能相関の研究		
	研究代表者	松下 道雄	東京工業大学・理工学研究科	准教授
計画研究	研究課題名 (H19-23)	光合成膜タンパク質間相互作用と膜形態変化を時空間で追跡する3次元超解像顕微分光法		
	研究代表者	熊崎 茂一	京都大学・理学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-23)	エックス線1分子計測によるイオンチャネル開閉ダイナミクスの解析		
	研究代表者	清水 啓史	福井大学・医学部	講師

公募研究	研究課題名 (H20-21)	膜蛋白質の機能変換から観る機能・構造変化の連関性と分子論的理解		
	研究課題名 (H22-23)	センサー型ロドプシンの分子科学:機能と構造変化の連関性		
	研究代表者	須藤 雄気	名古屋大学・理学研究科	准教授
公募研究	研究課題名 (H22-23)	時間分解分光法によるマイクロからマクロにおよぶタンパク質の反応ダイナミクスの理解		
	研究代表者	井上 圭一	名古屋工業大学・大学院工学研究科	助教
公募研究	研究課題名 (H22-23)	プロトン・水素結合と生体分子の理論化学		
	研究代表者	佐藤 啓文	京都大学・工学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H22-23)	生細胞内1分子 FRET 法による回転モータータンパク質のダイナミクス計測		
	研究代表者	飯野 亮太	東京大学・工学系研究科	講師
公募研究	研究課題名 (H22-23)	蛋白質中に存在する低障壁水素結合の特性解析		
	研究代表者	上久保 裕生	奈良先端科学技術大学院大学	准教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	NMR による蛋白質構造の協調的内部運動と機能制御相関解析		
	研究課題名 (H22-23)	イオンチャネルタンパク質 KcsA のイオン透過に伴う分子形態変化観測		
	研究代表者	楯 真一	広島大学・理学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	オルガネラ内タンパク質の分子科学		
	研究課題名 (H22-23)	膜タンパク質の生理分子科学		
	研究代表者	小倉 尚志	兵庫県立大学・大学院生命理学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	蛋白質の運動と連動する水和水のコヒーレントな集団運動の探索		
	研究課題名 (H22-23)	タンパク質疎水性表面に関する水和構造予測アルゴリズムの開発		
	研究代表者	中迫 雅由	慶應義塾大学・理工学部物理学科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	In-Cell NMR を用いた生細胞内蛋白質の物性・動態解析法の開発		
	研究課題名 (H22)	In-Cell による生細胞内蛋白質分子動態の解析		
	研究代表者	伊藤 隆	首都大学東京・大学院理工学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20-21)	ヒトガレクチン1の糖結合アロステリック効果の解析		
	研究代表者	平松 弘嗣	東北大学・大学院薬学研究科	助教
公募研究	研究課題名 (H20-21)	実空間と逆空間で探る生体分子の集団運動と局所運動の相関		
	研究代表者	城地 保昌	東京大学・分子細胞生物学研究所	助教
公募研究	研究課題名 (H20-21)	時間分割共鳴ラマン分光法による二原子酸素添加酵素の構造ダイナミクス		
	研究代表者	城 宜嗣	理化学研究所・播磨研究所	主任研究員
公募研究	研究課題名 (H20-21)	共焦点レイリー散乱相関顕微分光装置の開発と神経細胞群の動的イメージングへの応用		
	研究代表者	宇和田 貴之	城西大学理学部	助教
公募研究	研究課題名 (H20)	低温および時間分解赤外分光法によるロドプシンの構造変化の研究		
	研究代表者	神取 秀樹	名古屋工業大学・大学院工学研究科	教授
公募研究	研究課題名 (H20)	蛋白質内水素結合ネットワークの直接観測		
	研究代表者	片岡 幹雄	奈良先端科学技術大学院大学・物質創成科学研究科	教授

8. 研究費の使用状況(設備の有効活用、研究費の効率的使用を含む)

使用状況 (金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
平成 19 年度	189,400,000	0	189,400,000
平成 20 年度	250,000,000	0	250,000,000
平成 21 年度	198,290,000 (追加配分 12,990,000 を含む)	0	198,290,000
平成 22 年度	159,390,000 (追加配分 7,490,000 を含む)	0	159,390,000
平成 23 年度	143,300,000	0	143,300,000
総 計	940,380,000	0	940,380,000

本研究で購入した主要な備品を列挙し共同研究を含めた利用状況をまとめた。

◎関谷博 (A01) は水素結合クラスターの赤外分光のためにパルスQスイッチ Nd:YAG レーザー励起 IR-OPO を購入した。環状水素結合ネットワークにおける構造と水素結合作用、励起電子状態ダイナミクス の 解 明 の た め に 有 用 に 稼 働 し た 。 ま た 富 宅 (A01)、太 田 (A02) と の 温 度 ゆ ら ぎ に 関 す る 共 同 研 究 に 大 い に 役 立 っ た 。

◎藤井正明 (A01) は新規気化法開発のために超音速ジェットチャンバーの設計・試作を行ない、生体関連分子であるカテコールアミン神経伝達物質の気相分光において有用に稼働し、米澤 (A01) との共同研究で大いに活躍した。追加予算で凍結粉碎機クライオミルとワークステーションを購入し、三枝 (A01)、八木 (A01) の共同研究に多いに役立った。

◎藤井正明 (A01) は kHz チタンサファイア再生増幅器システムを購入し振動和周波分光を利用した細胞内部可視化を目指した赤外超解像顕微分光法の開発に対して有用に稼働した。また、古谷 (A01)、須藤 (A03) らとの共同研究に大いに役立った。

◎田原太平 (A02) は、多色のフェムト秒パルスを用いた非線形分光計測・超高速分光計測を行うために、大出力チタンサファイア再生増幅器および、そのパルス出力のモニターのためのオートコリレーターを購入した。新しい偶数次非線形分光の開発と応用に活躍した。本装置は、森田 (A02)、清水 (A03)、大西 (A02) との共同研究に大いに役立った。

◎大西洋 (A02) は、探針位置の検出精度を極限まで高めた周波数変調原子間力顕微鏡装置を製作するために、高速オシロスコープ、交直両用高圧アンプ等を整備した。温度安定性を高めるために整備した恒温槽と組み合わせることで世界最高水準の顕微鏡性能を達成しており、タンパク質等を水中で顕微計測する A02 班、A03 班との共同研究を試験した。

◎石橋孝章 (A02) は追加予算により蛍光分光光度計および回折格子を購入し、チャンネルタンパク質に対して和周波分光法を適用する清水 (A03) との共同研究に大いに活躍した。

◎水谷泰久 (A03) は大腸菌培養、タンパク質精製のための機器 (低温遠心機、シェーカー等) を購入した。これらによって、精製直後のフレッシュな試料を大量に測定に供することが可能になっただけでなく、他の研究グループへの試料提供の態勢を整えた。追加予算でバイオアナライザ、分取電気泳動システムを購入し、共同研究の試料供給にも大いに役立った。また、高繰り返しナノ秒パルスレーザー2台および分光器を購入した。タンパク質の共鳴ラマンスペクトル測定に有用に稼働した。また、他の研究グループ (須藤 (A03)、神取 (A03)、城 (A03)、清水 (A03)、片岡、上久保 (A03)) との共同研究に大いに活躍した。

◎加納英明 (A03) は微小試料のスキャニングのために3軸ピエゾステージを購入し、多光子分光イメージングの為に有用に稼働した。粟津 (A01) との共同研究にも大いに役立った。

◎松下道雄 (A03) は単一分子分光の為に機器 (シングルモードグリーンレーザー、電動アクチュエーター、プリアンプ付赤外線検出器等) を購入し、タンパク質の構造・機能相関研究に有用に稼働した。また、南後 (A02)、出羽 (A02) との共同研究でも大いに役立った。

◎熊崎茂一 (A03) は近赤外連続発振レーザーを購入し、既設の近赤外パルスレーザーと併用することによって2光子励起蛍光と1光子励起蛍光を系統的に比較することが容易になった。上に述べた購入機器は期間終了後もさらなる発展研究 (共同研究も含め) に活用されている。

9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度

本領域は分子科学とその関連分野で発達した計測技術と素過程的理解を融合し、新たな先端計測方法論を創出しつつ実在分子高次系の分子論的理解を目指した。得られた成果は世界の分子科学で高く評価される内容であり、高次系分子科学の名の下、研究の最前線を分子から分子システムという従来取り組まれていなかった領域に押し進め、分子科学と関連する学問分野に直接的な貢献を果たした。将来と日本の学問分野に対してそれ以上に重要なのは、実験、理論を問わず従来異なるコミュニティー（分子科学、物理化学、分子物理、生化学、薬学、光学、理論化学、計算科学など）の中で活動していた研究者が、高次系分子科学をテーマとして問題意識を共有して研究を推進したことで、古い分野の垣根が取り払われ、**新しい科学を生む広大な連携と広い視野の人的ネットワークの形成に成功した事**である。これは将来の日本の科学を考える上でも本質的に重要と考える。

具体的な研究貢献を述べる。たとえば、A01 班では、気相のクラスター研究者が生体分子機能に強い興味を持ち、気相で生体分子を研究する困難を新たなレーザー蒸発法を開発する事で克服して当該領域に大きなインパクトを与えた。従来は気相分光の学会で生体分子の研究発表を行う事は奇異の目で迎えられたが、現在は全く自然で最先端の研究として取り上げられており、**分光研究のパラダイムシフト**を実現した。この生体分子の気相研究が実現される過程ではナノ材料研究者との生体分子の蒸発を促進する新規マトリックス開発に関する共同研究や、MALDI 法に関する凝縮相振動分光研究者と理論化学研究者の蒸発機構解明など多くの共同研究が生まれている。さらに、大サイズ水クラスター研究による世界最小の氷構造の発見、分子の協調的運動が促進する多重プロトン移動、クラウンエーテルの分子認識観測など、気相クラスターの研究成果をもとに、実在高次系のダイナミクスの理解に繋がる成果が得られた。

A02 班で主たる研究対象の一つであった**液体界面の分子論的な研究**は、本特定領域のスタート時には、一部の研究者を除き注目している領域ではなかった。現在では、わが国はもちろん世界的に見ても極めてホットな分野になっており、**本特定領域で推進した研究が大きな貢献を果たし、世界的の大きな潮流を作ることができた**。この研究推進過程では凝縮相研究に関する実験研究者と理論研究者の関係が極めて密なものとなった。これは、空気／水界面の水構造に対する本質的な知見を得たことや、質量分析で重要な MALDI 法の解明ができたことなど特筆すべき業績の形に結実した。実験・理論の密な協力は今後の複雑系研究にますます必要とされるものであって、料来につながるような若い世代の実験－理論共同体制が生まれたことは当該および関連学問分野にとって大きい。

A03 班は新規計測法の開発を行い、従来の手法ではできなかった、生体分子の構造、機能メカニズムや生細胞中の生体分子の構造、機能ダイナミクスに関する研究を推進した。また、A01 班、A02 班が取り組んでいる分子の基礎過程の解明に基づき、タンパク質の運動性が生む機能の発現機構の解明を進めた。これらの研究を進めるにあたっては、共同研究やミニ公開シンポジウムを通して、積極的に異分野の研究との交流を意識した。これらの交流によって、分子科学研究者にとってはタンパク質に関して分子科学として取り組むべき問題が明確化し、タンパク質科学研究者にも市販の測定装置ではできなかった計測が新規計測法によって可能になり、新たな情報をもたらすことが強く認識されるようになった。このような相互作用によって、**タンパク質の問題が理解できる分子科学研究者と分子科学の手法と知識を理解できるタンパク質科学者を生み、それらの間に人的ネットワークを作った点**は、分子科学およびタンパク質科学の分野にとって大きな貢献であり、そのネットワークは今後の財産になる。また、共同研究を通じて得られた成果は分子科学、タンパク質科学のさまざまな機会に発表され、生物関連分野でも領域を超えた新しい研究の潮流として国内外の関係学術領域に大きなインパクトを与えた。

以上の様に本特定領域は既存の分野を超えた新たな分子科学の端緒として国内外の学術領域に大きなインパクトを与え、分野開拓と研究を生み出すネットワーク両面で大きく貢献した。

10. 研究計画に参画した若手研究者の状況

本領域では合計40件の若手の昇進が報告されている。

領域内の研究室で博士課程学生から博士研究員に着任した者が9名おり、うち、外国での着任が2名、理研のジュニアリサーチアソシエイトが1名である。博士課程学生から博士研究員を経ずに、直接分子科学研究所の助教として採用されたものも1名居り、合計10名が学術領域での重要な第一歩を踏み出している。

領域内の博士研究員のうち、助教として栄転したものが10名おり、加えて特任助教として昇任したものが3名、計13名が助教クラスへの昇進を果たしている。助教のポストは狭き門であり、本分野に取って重要な次世代を本領域から送り出せた事になる。

さらに、若手助教も大きく躍進しており、講師として栄転したものの3名、准教授として栄転したものが5名おり、講師から准教授への栄転1名、准教授から教授への栄転3名と合わせて14名が本領域から次世代のリーダーたるポストに昇進を果たしている。

本領域はミニシンポジウムなどで若手研究者にも講演の機会を与え、また、合同班会議では世代を超えて徹底的に討論するなど若手研究者の活性化を考慮してきた。ミニシンポジウム等の企画運営にも可能な限り携われる様に進めた。たとえば、第11回ミニシンポジウム(2010年11月26-27日、仙台市)は企画運営も講演も全て若手で行った純然たる若手シンポジウムである。この運営は国際評価委員会からも高く評価されている。研究成果に記載した126件の受賞も日本化学会進歩賞2件に代表される様に、多くが若手研究者、大学院学生に対するものであり、上記の昇進と合わせ、若手の活躍によって領域が大きく発展できた事を示しており、次世代のための特定領域となったと考えられる。

○博士課程学生から博士研究員に着任 9名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向(着任先)
A01	関谷博	斉田謙一郎	上智大学大学院理工学研究科博士研究員を経て 英国リーズ大学化学科リサーチフェロー
A01	三枝洋之	浅見祐也	学振特別研究員(DC1)
A01	三枝洋之	浦島周平	学振特別研究員(DC1)
A01	鈴木正	倉持光	理化学研究所・ジュニア・リサーチ・アソシエイト(JRA)
A02	出羽毅久	角野歩	学振特別研究員(DC2)
A02	奥山弘	熊谷崇	学振海外特別研究員(ドイツ・フリッツハーバー研究所)
A03	佐藤啓文	飯田健二	分子科学研究所IMSフェロー
A03	楯真一	中野祥吾	ERATO浅野酵素活性分子プロジェクト博士研究員(富山県立大学)
A03	中迫雅由	松岳大輔	ERATO村田脂質活性構造プロジェクト博士研究員(大阪大学)

○博士課程学生から助教に着任 1名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向(着任先)
A01	藤井朱鳥	水瀬賢太	自然科学研究機構分子科学研究所助教

○博士研究員から助教に着任 10名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向(着任先)
A01	藤井正明	井上圭一	名古屋工業大学大学院工学研究科助教
A01	富宅喜代一	山田勇次	福岡大学理学部助教
A01	富宅喜代一	藤原亮正	大阪府立大学理学部助教
A01	米澤徹	西田直樹	中央大学理工学部助教
A01	米澤徹	兵野篤	北海道大学大学院工学研究院助教
A01	立川仁典	北幸海	横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科助教

A02	大西洋	野本知理	千葉大学工学部助教
A03	佐藤啓文	横川大輔	名古屋大学大学院理学研究科助教
A03	小倉尚志	柳澤幸子	兵庫県立大学大学院生命理学研究科助教
A03	宇和田貴之	宇和田貴之	城西大学理学部助教

○博士研究員から特任助教に着任 3名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向 (着任先)
A01	立川仁典	小関準	北里大学薬学部特任助教
A03	松下道雄	藤原正規	分子科学研究所特任助手
A03	松下道雄	大友康平	北海道大学電子科学研究所特任助手

○助教から講師に着任 3名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向 (着任先)
A03	清水啓史	清水啓史	福井大学医学部講師
A03	小倉尚志	山口悟	岡山理科大学臨床生命科学科講師
A03	飯野亮太	飯野亮太	東京大学工学系研究科講師

○助教から准教授に着任 5名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向 (着任先)
A01	赤井伸行	赤井伸行	東京農工大学院BASE准教授
A01	古谷祐詞	古谷祐詞	分子科学研究所准教授 JSTさきがけ研究「光エネルギーと物質変換」領域に採択
A01	大島康裕	長谷川宗良	東京大学総合文化研究科准教授
A02	山方啓	山方啓	豊田工業大学大学院工学研究科准教授
A03	須藤雄気	須藤雄気	名古屋大学大学院理学研究科准教授 JSTさきがけ研究「光の利用と物質材料・生命機能」領域に採択

○講師から准教授に着任 1名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向 (着任先)
A02	大西洋	木村健次郎	神戸大学理学研究科准教授

○准教授から教授に着任 5名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向 (着任先)
A01	関谷博	南部信孝	上智大学理工学部教授
A01	藤井正明	鈴木正	青山学院大学理工学部教授
A01	富宅喜代一	石川春樹	北里大学理学部教授
A01	米澤徹	米澤徹	北海道大学大学院工学研究院教授
A02	中野実	中野実	富山大学大学院医学薬学研究部教授

○その他 3名

班名	研究代表者	若手研究者氏名	動向
A01	八木清	八木清	山梨大学燃料電池ナノ材料研究センター講師から 米国イリノイ大学 Visiting Research Assistant Professor に着任
A02	矢野陽子	矢野陽子	立命館大学総合理工学研究機構チェプロフェッサーから 近畿大学理工学部准教授に着任
A03	加納英明	加納英明	東京大学理学系研究科准教授から 筑波大学数理物質系准教授に着任

1.1. 総括班評価者による評価の状況

総括班評価グループ

・発表も質疑応答も高いレベルである。個々の研究だけでなく、グループ研究としての成果も素晴らしい。例えば、ひとつのタンパク質に対して8つの独立した手法で研究が行われている。グループ研究のあり方の好例である。基盤研究の集合ということでなく、特定領域研究を組織した意義があった。本特定領域は目的を見事に達成している。本領域は大変うまくいっている。このまま終わらすべきではない。(北川禎三)

・素晴らしい成果を上げたことに素直に「おめでとう」というべきだと思う。この特定領域研究で得られた成果を基に、概念化を念頭に次の展開を考えて欲しい。(中村宏樹)

・全国的に良い研究がでており、広がりを感じた。最大公約数ではなく、先鋭化したトピックスをねらって進めるのが良い。ミニシンポはそれに対しても良いアイデアである。ニュースレターに成果報告を出している人が特定の人に偏っていないのが良い。今後も概念化とブレイクスルーを狙って一層大きく展開してほしい。(吉原経太郎)

・基本分子から大きな分子系までを一同に取り扱って研究するというということで大変興味深く、成功している。ミニシンポジウムはおもしろい。(増原宏)

・一定の方向性を保ちつつ個々の研究は極めて個人的で大変うまく行ったと思う。分子のシステムの問題を考えるこの特定領域は、化学全体の潮流を変えるポテンシャルがある。大きな分子システムに取り組んだ事は極めて重要であり、多くの芽が生まれている。今後も広い範囲の大きなシステムに展開してほしい。この特定領域のようなすばらしいボトムアップ研究と学術会議等からのトップダウンが繋がると良い。(茅幸二)

国際評価委員会 (英国 Klaus Müller-Dethlefs、仏国 Christophe Jouvet、米国 Paul Champion、カナダ Gilbert Walker、イスラエル Sanford Ruhman、韓国 Seong Kim、インド Kankan Bhattacharyya)

本プロジェクトは A01 気相、A02 凝縮相、A03 生体系という3つの異なる領域の間に学際領域を打ち立てる事を目的としている。本国際評価委員会は本プロジェクトが最高の賞賛に値する水準で当初の目的を達成していると結論する。多数の研究グループの協奏的な努力により新たな方法論が開拓され、また既存の方法には新しくエキサイティングな適用対象が開拓され、この研究領域のフロンティアが著しく拡大された。この特定領域はユニークであり、研究に対する国際的なモデルを示すものである。

この領域のハイライトとなる研究は現在の研究水準を顕著に前進させ、将来の研究の方向性に大きく影響を与えるものである。研究成果の量としても極めて印象的である。特定領域の成功尺度とも言える共同研究による成果は2009年の国際評価委員会以降で倍増しており、互いの研究「言語」を学び、新たなアイデアを融合させている。共同研究に関してもこれ以上は望めないレベルで達成されている。全ての領域で理論と実験の連携が適切に行われている。この強い相互作用は印象的なほど多く研究会を行ってきた事に由来する。特に、その多くが若い世代により主催されている事に喜びを感じる。これは日本の若い研究者を将来のエクセレンスに育てる素晴らしい方法である。

本国際評価委員会は学会並びに政府機関に対しこの基礎研究における先見的プログラムの成功をお祝い申し上げる。本プロジェクトは科学のフロンティアを非常に大きく前進させており、継続し、拡大する事が望ましい。