

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 9 日現在

機関番号：82401

研究種目：国際共同研究加速基金（国際活動支援班）

研究期間：2015～2017

課題番号：15K21740

研究課題名（和文）理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学の国際活動支援

研究課題名（英文）Support for International Activities of Studying the Function of Soft Molecular Systems by Concerted Use of Theory and Experiment

研究代表者

田原 太平 (TAHARA, Tahei)

国立研究開発法人理化学研究所・田原分子分光研究室・主任研究員

研究者番号：60217164

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 16,000,000円

研究成果の概要（和文）：「柔らかな分子系」では次世代の研究を支える若手の人材育成のため国際活動支援班を組織し、若手海外派遣プログラム、共同研究のための研究者派遣および外国人研究者の招へいを行った。については総括班予算によりすでに平成25年度から行ってきたが、本予算により20名の若手を国際会議に派遣した。派遣に際しては研究室訪問など積極的な研究交流を強く推奨したが、その成果は報告を義務付けた領域ニュースレターでの若手の生き活きとした姿からうかがい知ることができる。については6件の派遣と7件の招へいを行い、その結果としてNat. Commun., PNASなどに6報の国際共同研究論文を発表することができた。

研究成果の概要（英文）：In the "soft molecular systems" project, we organized a group that supports international activities of members, and conducted two programs. The first program aims at sending young researchers abroad. We started this program at the beginning of the "soft molecular systems" project, 2 years before this grant project (15K21740) started. We requested young researchers not only to participate in the conference abroad, but also to visit laboratories for discussion. They are requested to report their activities in Newsletter. Using this grant, we sent 20 young researchers abroad, whose active communications with foreign researchers can be seen in Newsletter. The second program supported international collaboration of members, for which we sent 6 researchers abroad, and invited 7 researchers from abroad. As a result, 6 papers have been published in high-impact journals, including Nat. Commun. and PNAS. The two programs thus contributed the success of the "soft molecular systems" project.

研究分野：物理化学

キーワード：分子複雑系 理論・計算 先端計測 機能創成 分子科学

1. 研究開始当初の背景

新学術領域研究「柔らかな分子系」では分子科学、生物物理学、合成化学、理論・計算科学の叡智を集め、革新的な分子理論による理解と予測、最先端計測による現象観測、合成化学や遺伝子工学を駆使した機能変換・創成を協奏的に行い、理論と実験を融合させた「柔らかな分子系の科学」の創出を行うことを目指した。

我々は本領域を開始するにあたり、次世代の研究を支える若手の人材育成を重要視した。そこで総括班が行う領域マネジメントおよび研究支援活動の一つとして「大学院生、若手研究者の海外研究集会参加支援」を実行し、グローバルな研究交流の機会をつくるために国際研究集会に参加できるよう、大学院生や若手研究者を対象とした支援を行ってきた。この支援は全職員より推薦を募り、総括班の審査によって派遣者を決定するものである。派遣の際には国際学会等への出席だけでなく、その機会に近隣の研究室を訪問し、セミナー発表を行うなど積極的な研究交流を強く推奨した。支援を受けた若手研究者は領域ニュースレターにて海外派遣の報告を行うことを義務付けた。

平成 25 年度には 11 名(大学院生 7 名、博士研究員 4 名)、平成 26 年度には 11 名(大学院生 8 名、博士研究員 3 名)の若手を海外の研究集会に派遣した。この活動の成功は、領域ニュースレターでの若手研究者の生き生きとした姿から十分にうかがい知ることができる。平成 27 年度に創設された科研費「国際活動支援班」の活動を、我々の領域ではすでに平成 25 年度から先取りして行っており、大きな実績を挙げていたことは強調しておきたい。

2. 研究の目的

本新学術領域では異なる分野で世界トップのアクティビティを有する我が国の研究者を連携し、広い視野に立った研究推進体制を作って狭い分野の枠を打破した新しい学術領域の創成を試みた。これによりこれからを担う多様な研究者が強く相互作用し、物質科学とその関連分野に新しい方向性を示すことを目指したのである。この領域によって形成される新しい研究者間のネットワークは、研究期間終了後にも形を変えながら発展を続けると期待できる。さらに、この新学術領域推進における異分野の融合と研究の先鋭化を通して、これまでになく新しく広い視野を持った次世代の研究者を育成しようと考えた。本領域で育った研究者たちは、研究期間終了後も我が国の物質科学研究の将来の展開に大きく寄与することが大きく期待される。

本領域では、個々の研究者がそれぞれ積極的に国際的な研究ネットワークを構築し、多くの共同研究を推進している。しかし、それらの多くは同じ研究手法や研究対象をもつ

研究者の間で自然発生的に生じたものであって、共同研究の範囲は比較的狭い範囲に限られている。領域として国際活動を支援する必要性は、本領域の活動によって構築された異分野研究者間のネットワークを海外の研究者を含めたものにまで広げ、この本領域の活動を国際的なレベルで駆動することにある。これは領域全体として国際活動を強く支援することによって初めて可能になることであり、国際活動の支援は必要不可欠であると言える。そこで国際活動支援班によって、本領域で得られた成果を領域のサポートのもとに積極的に世界に発信し、我が国の研究の優位性を国際的研究者コミュニティの中で確保するとともにネットワークを国際的なものへと広げ、わが国のプレゼンスを示しつつ国際社会に貢献する。

3. 研究の方法

前項の目的を達成するための戦略として、本領域では、若手海外派遣プログラム、国際共同研究のための研究者派遣および外国人研究者の招へい、を 2 つの柱とした国際活動支援を行うこととした。これら 2 つの国際活動支援は、戦略に基づいて領域の研究活動を活性化するものである。概略を以下に示す。

若手海外派遣プログラム

将来を見据えた領域活動を達成するためには、既にエスタブリッシュされた研究者だけでなく、次世代を担う大学院生、若手研究者が共同研究を通して新しい分野に進出する事が重要であり、これが革新的・挑戦的な学術研究の発展を生み、将来的に我が国の国際社会における存在感を維持・向上することにつながっていく。そこで、大学院生、若手研究者が、領域の研究成果を国際発信するとともに新たな研究分野の情報収集のために国際研究集会に積極的に参加できるように、第一の柱として若手海外派遣プログラムを実行する。これによって広く共同研究のシードを発掘していく。この活動はすでに総括班活動として本領域で行っているものを拡充するものである。

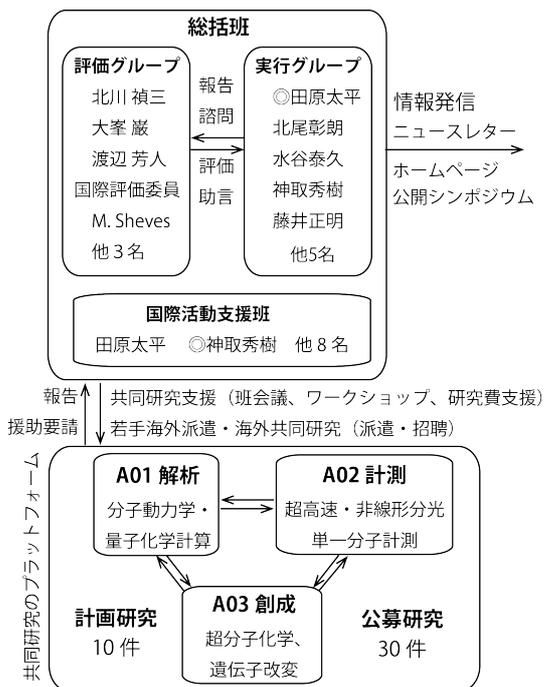
共同研究のための研究者派遣および外国人研究者の招へいプログラム

上記の大学院生・若手研究者の支援に加えて、実際に国際的な共同研究を進めて成果を上げていくことが、世界的に評価される研究を成し遂げていくためには必須である。本領域のカバーする研究領域は広いが、その中で異分野連携と同時にその高度化を図るためには、国内の共同研究者と相補的な関係にある海外の研究者と国際共同研究を進めることが重要である。これを実現するためには、共同研究を行う研究室の間で研究者を短～中間期相互派遣し、密な共同研究の遂行を行うことが有効である。そこで第二の柱として

国際共同研究のための研究者派遣および外国人研究者の招へいを行う。これは国際活

動支援班の設置とともに新しく始める活動である。

下図は領域の体制を示したものである。総括班は、研究方針の策定を行い、研究項目間の調整・サポート・総括を行う。総括班は、研究代表者を含む計画研究代表者 10 名からなる実行グループと国内の研究協力者 3 名と国際評価委員 4 名からなる評価グループ、さらに新設する国際活動支援班から構成される。実行グループは、全体の研究方針を策定し、研究を推進するための支援活動を行うが、本領域では各研究項目間での密接な連携が研究推進の要となることを考慮して、領域内の共同研究を促進するための研究支援、領域内の研究者によって提案されるワークショップの開催支援などを行う。年度ごとに班会議を行って領域内での研究成果を共有すると共に、ニュースレターやホームページを通じて情報交換を促進し、共同研究の醸成をはかる。社会還元としての情報発信を進めるため、公開シンポジウムを開催し、研究成果を広く知らしめる。得られた研究成果は、ホームページにより内外に広く発信する。国際活動支援班は実行グループと緊密に連携しながら、若手海外派遣および国際共同研究のための国際活動支援を行う。評価グループは、領域全般の研究に関して世界的な動向をも含めた評価や提言を行う。



新たに組織する国際活動支援班は神取秀樹 (名工大、A03 項目班長) を班長として、計画班研究代表者をメンバーとする。国際活動支援班は、若手海外派遣プログラムおよび国際共同研究のための研究者派遣および外国人研究者招へいプログラムを推進する。両プログラムへの応募は領域代表が全班員から募り、総括班実行グループで議論して採択者を決定する。採択者は、国際ネットワ

ークの開拓や強化に資するべく支援を活用する。これらの支援により得られた成果は、採択者から総括班へ適宜報告することとし、さらに本領域のニュースレター、ホームページ、公開シンポジウムにて積極的に領域外へ情報発信する。また、国際支援活動の状況は、実行グループから評価グループへ報告し、適切な助言を受ける。

本計画に挙げた国際活動支援活動を行ううえでは、多くの事務業務が伴う。そのため、本領域の事務局とは別に、国際活動支援班長のもとに新たな担当事務局を名工大に置き、ここが事務業務を担当することとした。

4. 研究成果

我々の領域ではすでに平成 25 年度から国際活動支援を総括班の予算により行っていたため、きわめてスムーズに本科研費活動を開始し、大きな成果を挙げる事ができた。以下に年度ごとの活動を示す。

平成 27 年度はまず を中心に行った。総括班による「大学院生、若手研究者の海外研究会参加支援」を引き継ぐ形で国際活動支援班の活動を行ったところ、平成 27 年度の後期に班員より推薦のあった大学院生・若手研究者を審査の上、4 名を海外に派遣した(アメリカ 3 名、イタリア 1 名)。

平成 28 年度は に関して 9 件、 に関して 4 件の支援を行った。 については初年度から実行しているため領域内に完全に定着しており、渡航者は国際学会等への出席だけでなく、その機会に近隣の研究室を訪問し、セミナー発表を行うなど積極的な研究交流を行った。平成 28 年度も大学院生から博士研究員、助教の 9 名をアジアや欧米へ派遣したが、積極的な研究交流はニュースレターで紹介されている通りである。 については、共同研究論文の発表を強く推奨する形で全班員に周知し、応募分について総括班の審査により 3 名の派遣と 1 名の招へいを決定した。本領域は活発な領域内共同研究が進行しているが、ここに国際共同研究が加わったことは新たな展開をもたらすことが期待された。

平成 29 年度は に関して 7 件、 に関して 9 件の支援を行った。 については大学院生や博士研究員の 7 名をアジアや欧米へ派遣した。すべての積極的な研究交流はニュースレターで紹介されている通りである。 については、本年度も共同研究論文の発表を強く推奨する形で全班員に周知し、応募分について総括班の合議により 3 名の派遣と 6 名の招へいを決定した。

以上をまとめると、 については本科研費の支援により、20 名の若手研究者を海外に派遣した。初年度からの派遣分を合計すると 51 名となり、派遣先は韓国、中国、台湾、シンガポール、インド、オーストラリア、ニュージーランド、イギリス、フランス、オランダ、ベルギー、ドイツ、チェコ、スペイン、アメ

リカ合衆国、アルゼンチンとほぼ世界中に若手を送ることとなった。特筆すべきは、このような若手のアクティビティがニュースレターを通して領域内外へと発信されたという点である。ニュースレターは領域ホームページを通して国民に公開されており、誰でも見ることができる。若手研究者は、国際会議出席に際して、どこの研究室を訪問し、どのような交流を行うか、ごく自然に考えるようになっており、このことが最大の成果と言えるかもしれない。我々は本科研費がなくとも総括班の予算によりこの若手支援を継続していたが、本科研費により総括班の経費を別の目的に使うことができたことに改めて感謝したい。

本領域では、海外研究者との積極的な共同研究を進めてきた。計画研究だけでも、20件以上の共同研究（共同研究先：ベルリン工科大、ベルリン自由大学、Max-Planck Inst.、Keele Univ、エクス・マルセイユ大ノパリ第11大、Univ. Strasbourg、LICSEN、CNRS-Strasbourg、マンチェスター大、Univ. London、Univ. East Anglia、韓国忠北大、ソウル大学、VU Univ. Amsterdam、Guelph Univ.、台湾国立清華大学、Hong Kong Univ Sci. Tech.、Univ. Sofia、IACS India、IIT Madras、タタ基礎研究所、Kent State Univ.、Carlton College など）が進行し、多数の論文発表を行っている。このような現状の中で、についてはなるべく新しい国際共同研究を推奨した。合計13件の中で、派遣は6件、招へいは7件であり、活発な交流の結果としてよい成果を挙げることができた。実際、6報の既報論文の中には、*Nat. Commun.* や *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* などのプレミア雑誌も含まれ、高い注目を集めた。これらの成果についてもニュースレターを通して公開されている。

5. 主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

以下に、本国際活動支援班の行った活動の成果である領域グループの国際共同研究で得られた成果に関する論文、および海外派遣プログラムのサポートを受けて若手研究者が行った国際学会発表をリストする。

〔雑誌論文〕(計6件)

T. Ogawa, N. Yanai, S. Fujiwara, T.-Q. Nguyen and N. Kimizuka: "Aggregation-free sensitizer dispersion in rigid Ionic crystals for efficient solid-state photon upconversion and demonstration of defect effects" *J. Mater. Chem. C* in press (2018). 査読有

S. Hayward and A. Kitao: "Multi-strand β -sheet of Alzheimer $A\beta(1-40)$ folds to β -strip helix: Implication for protofilament formation" *J. Biomol. Struct. Dyn.* in press (2018). 査読有

B. Narayan, K. Nagura, T. Takaya, K. Iwata, A. Shinohara, H. Shinmori, H. Wang, Q. Li, X. Sun,

H. Li, S. Ishihara and T. Nakanishi: "Effect of regioisomerism on the photophysical properties of alkylated-naphthalene liquids" *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 2970-2975 (2018). 査読有

S. Gulati, B. Jastrzebska, S. Banerjee, Á. L. Placeres, P. Misztá, S. Gao, K. Gunderson, G. P. Tochtrop, S. Filipek, K. Katayama, P. D. Kiser, M. Mogi, P. L. Stewart and K. Palczewski: "Photocyclic behavior of rhodopsin induced by an atypical isomerization mechanism" *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 114, E2608-E2615 (2017). 査読有

K. Yazaki, M. Akita, S. Prusty, D. K. Chand, T. Kikuchi, H. Sato and M. Yoshizawa: "Polyaromatic molecular peanuts" *Nat. Commun.* 8, 15914 (2017). 査読有

S. Prusty, K. Yazaki, M. Yoshizawa and D. K. Chand: "A truncated molecular star" *Chem. Eur. J.* 23, 12456-12461 (2017). 査読有

〔学会発表〕(計20件)

T. Shionoya, M. Mizuno, T. Tsukamoto, Y. Sudo and Y. Mizutani: "Subunit-subunit interaction in a light-driven proton pump from a thermophilic bacterium: Effects on hydrogen bond of the chromophore", The 6th Asian Spectroscopy Conference (Hsinchu, Taiwan) Sep. 2017.

H. M. Dokainish, D. Yamada, T. Iwata, H. Kandori and A. Kitao: "Electron fate and mutational robustness in the mechanism of (6-4) photolyase-mediated DNA repair", WATOC2017-World Association of Theoretical and Computational Chemists (Munich, Germany) Aug. 2017.

A. Shinobu, K. Takemura and A. Kitao: "Refining binding free energies of docked complexes by sampling configurations during molecular dynamics simulations", Conformational Ensembles from Experimental Data and Computer Simulations (Berlin, Germany) Aug. 2017.

A. Mohammed, K. Inoue, S. Nihonyanagi and T. Tahara: "Unveiling energetically isolated water at hydrophobic ion/water interface by time-resolved heterodyne-detected VSFG spectroscopy", International Conference on Time Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2017) (Cambridge, UK) Jul. 2017.

H. Yamaura, K. Usui, Y. Hashimoto, K. Yamamoto and T. Murahashi: "Reductive coupling of tropylium trinuclear sandwich complexes", EuCheMS International Organometallic Conference XXII (EuCOMC2017) (Amsterdam, Netherland) Jul. 2017.

K. Takase and K. Nakano: "Synthesis and chiroptical properties of chiral p-conjugated spiro compounds", 17th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (Stony Brook,

USA), Jul. 2017.

S. Tomida, S. Ito, K. Inoue and H. Kandori: "FTIR analysis of internal water molecules of a light-driven sodium pump KR2", 253rd ACS National Meeting & Exposition "Sunlight-Driven Processes: Exposing the Mechanism Underlying Productive Photoactivities" (San Francisco, USA) Apr. 2017.

K. Mizuse and Y. Ohshima: "High-resolution ion imaging study of molecular dynamics: Application of newly developed space-slice technique", Stereodynamics2016 (Taipei, Taiwan) Nov. 2016.

Y. Yamauchi, M. Konno, Y. Kato, S. P. Tsunoda, K. Inoue and H. Kandori: "Molecular functions of rhodopsin-like proteins from *Guillardia theta*", 17th International Conference on Retinal Proteins (Potsdam, Germany) Oct. 2016.

M. Okuno and T. Ishibashi (Invited): "Molecular orientation and conformation of fluorinated polymers at interface studied by vibrational sum frequency generation spectroscopy", SCIX 2016 CONFERENCE (Minneapolis, USA) Sep. 2016.
他。

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

○出願状況(計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況(計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ

<http://yawaraka.org/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

田原 太平 (TAHARA, Tahei)

国立研究開発法人理化学研究所・田原分子
分光研究室・主任研究員

研究者番号：60217164

(2) 研究分担者

神取 秀樹 (KANDORI, Hideki)

名古屋工業大学・工学(系)

研究科(研究院)・教授

研究者番号：70202033

水谷 泰久 (MIZUTANI, Yasuhisa)

大阪大学・理学研究科・教授

研究者番号：60270469

北尾 彰朗 (KITAO, Akio)

東京工業大学・生命理工学院・教授

研究者番号：30252422

藤井 正明 (FUJII, Masaaki)

東京工業大学・科学技術創成研究科・教授

研究者番号：60181319

(3) 連携研究者

森田 明弘 (MORITA, Akihiro)

東北大学・理学研究科・教授

研究者番号：70252418

林 重彦 (HAYASHI, Shigehiko)

京都大学・理学研究科・教授

研究者番号：70402758

高橋 聡 (TAKAHASHI, Satoshi)

東北大学・多元物質科学研究所・教授

研究者番号：30283641

村橋 哲郎 (MURAHASHI, Tetsuro)

東京工業大学・理工学研究科・教授

研究者番号：40314380

中西 尚志 (NAKANISHI, Takashi)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・

国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・

独立研究者

研究者番号：40391221