

ICR OBAKU

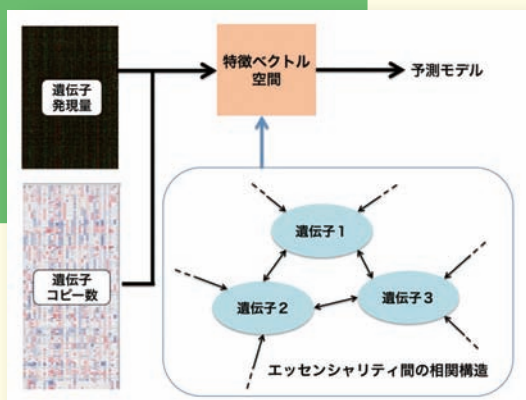
黄 檗

News Letter

by Institute for Chemical Research,
Kyoto University

2015年2月 NO.42

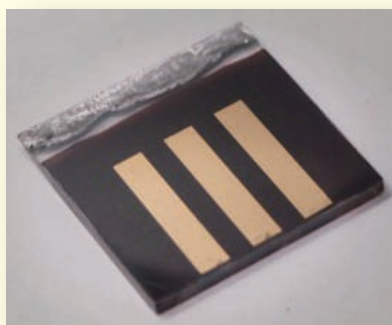
京都大学 化学研究所



所長就任にあたって

1~2

所長 時任 宣博



研究ハイライト

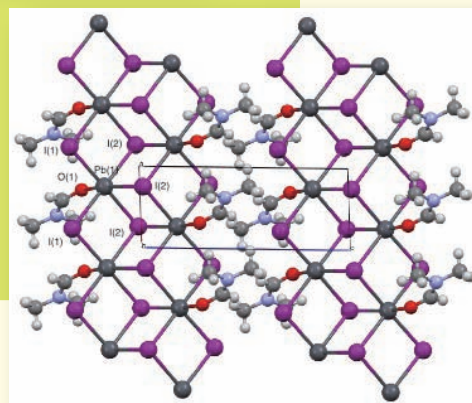
有機-無機ハイブリッド型太陽電池 9~10

准教授 若宮 淳志

データマイニングによる生命科学へのアプローチ
~Broad-DREAM 遺伝子エッセンシャルティ予測チャレンジ第1位を達成~

助教 烏山 昌幸

11~12



所長就任にあたって

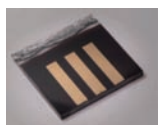
Contents

- 1 所長就任にあたって
所長 時任 宣博
- 3 所長退任にあたって
前所長 佐藤 直樹
- 3 ICR NEWS
化研らしい融合的・開拓的研究
共同利用・共同研究拠点 2014年活動報告
- 8 報道記録2014
- 9 研究ハイライト
有機―無機ハイブリッド型太陽電池
准教授 若宮 淳志

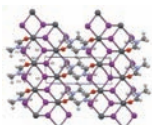
データマイニングによる
生命科学へのアプローチ
～Broad-DREAM遺伝子エッセンシャルティ
予測チャレンジ第1位を達成～
助教 鳥山 昌幸
- 13 研究トピックス 若手研究ルポ
ポリマー／イオン液体ブレンド膜の開発
准教授 大野 司

放射光を利用する
溶液X線吸収分光法の開拓
准教授 高谷 光
- 14 新任教員紹介
- 15 碧水会
定期役員会・涼飲会・所内案内ビデオ
上映&所内ミニツアーを開催
KEGGお薬手帳 金久 寛
会員のひろば 中原 勝・坪師 知行・田中 裕美
- 17 掲示版
裏表紙 化研点描
おおいに学び、考え、チャレンジする
教授 年光 昭夫

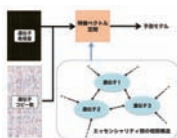
表紙図について



↑ ペロブスカイト型
太陽電池
詳細はP9



↑ PbI₂・DMF錯体の
X線結晶構造
詳細はP9



← 予測システムの概念図。
エッセンシャルティ間の
相関構造を埋め込んだ特
徴ベクトルを抽出。
詳細はP11

化学研究所 所長 時任 宣博

はじめに

先の黄檗41号にて佐藤直樹前所長の所長再任挨拶がなされたばかりというところで、続けて私の所長の就任挨拶を申し上げることになりましたので、はじめに簡単にその経緯をご説明させていただきます。

京都大学では、松本紘第25代総長の任期満了ご退任を受けて、平成26年10月1日付で山極壽一先生が新総長(第26代)にご就任になりました。同時に京都大学執行部も刷新されましたが、その中で新しい役員のお一人として、前所長の佐藤直樹先生が財務・施設・環境安全保健担当の理事・副学長に就任されました。この佐藤先生の理事・副学長ご就任に伴い、所長の任期途中での退任という状況が生じたために、異例の措置となりましたが、化学研究所の規定に従って9月に所長選考を実施し、私が所長に選出されたという次第です。このように、年度途中での所長交替という極めて稀な事態となりましたが、10月1日付をもちまして新たに所長を拝命いたしましたので、ここに就任のご挨拶をさせていただきます。

歴史の重みと確かな将来を見据えて

化学研究所は、今年、創立89周年を迎えます。前身の京都帝国大学理科大学化学特別研究所は1915年の設置ですので、そこから数えれば100年という京都大学で最も歴史ある研究所であり、人間で言えば米寿、白寿を超える輝かしくまた誇らしい歴史を持つ研究所と言えるかと思います。しかし、化学研究所は、単に歴史を重ねて現在に至っているわけではなく、その設立理念に基づく「化学に関する特殊事項の学理および応用の研究を掌る」研究所として、様々な時代の要請に対し常に柔軟かつ積極的に応える努力を続け、現在の魅力と活力に溢れた研究教育体制を築いてまいりました。

一方、ご承知のように昨今の研究所を取り巻く事情は学内外で厳しさを増しております。化学研究所における自由かつ独創的な研究環境を維持・発展させるためには、所内外の皆様のご協力を得ながら新所長として精一杯努力する所存ですので、ご指導・ご鞭撻のほどどうぞよろしくお願い申し上げます。

現在、京都大学は大きな転換期を迎えており、種々の新制度の立ち上げが議論・検討されています。政府の産業競争力会議や教育再生実行会議の意向を受けて文部科学省が打ち出した「国立大学改革プラン」(平成25年11月)の平成28年度からの第3期中期目標期間においては、「自学の強み・特色を生かして改善・発展できる体制を整え、競争に堪え高い付加価値を生み出す大学となるような努力と実績」を評価基準にした予算配分方針をとることを明確に掲げ、第2期の残りの平成26年度および27年度を「大学の機能強化のための改革加速期間」と位置づけています。本学では、これを念頭に置き



つつ、昨年度末にまとめられた「京都大学の持続的発展を支える組織改革の骨子」に沿った取り組みが進められており、新総長のご指導の下でも、引き続き「学域・学系制度」の導入による教員組織および教育研究組織の在り方の大幅な大学改革が議論・検討されておりまして、平成27年度から新制度に基づく大学運営が開始される予定です。教員の人事選考や定員管理という重要な項目が、従来の部局単独という単位から、学域・学系というより幅広い単位での審議・検討事項として扱われることになります。その過程では、従来の教育研究組織と新しく設定される学域・学系(学系群)などの新しい教員組織との関係の明確化やお互いの権限・義務の確認など、種々難しい問題を早急に解決する必要がありますが、各教育研究組織では、平成26年度当初から始まった8年間に及ぶ教職員の定員削減計画の実施義務も抱えており、新制度との調整・実施にはまだ色々と紆余曲折があるものと推察しております。

化学研究所といたしましては、直近の学内での制度改革等においては、今後の研究所における研究教育が従前と同等あるいはそれ以上のレベルで実施可能となるよう、これまで諸先輩方が築かれてきた長い研究所の歴史と豊富な研究教育上の実績を有効に活用しつつ、柔軟かつ積極的に議論に加わっていきたいと考えておりますので、皆様方からの建設的なご意見・アドバイスをよろしくお願いいたします。

さらなる情報発信力の強化と所外との研究交流促進

化学研究所では、第2期中期目標期間での大きな実施事業として、共同利用・共同研究拠点(「化学関連分野の深化・連携を基軸とする先端・学際研究拠点」：平成22-27年度)を推進しております。平成25年度に実施されたその中間評価では、全所を挙げて取り組んでいる拠点活動実績が高く評価され、その共同研究実績とともに国際交流展開の成果が認められました。平成24年度実施の化学研究所外部評価(平成25年度に報告書刊行)では、現状の研究教育実績については高い評価を頂くとともに、今後の化学研究所の目指すべき方向性とともに必要と思われる改善点について明確なご指摘を受けました。今後は、化学研究所で活発に進められている高いレベルの研究教育活動の成果を、さらに迅速かつ強力に国内外に情報発信できるよう、化研執行部、

担当事務室、広報室をはじめ、所内の皆様と協力して研究所の運営にあたりたいと考えております。

また、所内外での連携・融合研究の支援に加えて、海外学術研究拠点との若手研究者・大学院生の双方向交流促進にも積極的に取り組んでいます。これらの研究所独自の柔軟な研究および交流支援を通じて、真にグローバルな視点を持ち国際的ビジビリティに富んだ優秀な人材の育成が達成できるものと大いに期待しています。そのためにも、学内外の様々な立場の方々からの直接間接のご支援が非常に心強く重要なものであると認識しております。引き続き、皆様からのご指導ご鞭撻と今後一層のご高配をよろしくお願いいたします。

研究所の運営体制について

今回の所長就任は、年度途中の急な所長交替という状況を受けてのものでしたので、佐藤前所長時代からの継続的かつ円滑な研究所運営を期待し、引き続き辻井敬亘教授と青山卓史教授に副所長をお願いすることにいたしました。また、共同利用・共同研究拠点活動の統括責任者として、継続して渡辺宏教授に共同研究ステーション長をお願いしております。私自身は、平成20年度から23年度まで4年間所長を務めさせて頂きましたので、研究所の運営に関しある程度の経験と知識は持ち合わせておりますが、所内外の環境は常に激しく変化しておりますので、改めて諸環境の現状を正しく観察・認識した上で、皆様のご協力を仰ぎつつ、研究所の進むべき道を見誤らないよう前進していきたいと思っております。

化学研究所 副所長



辻井 敬亘 教授



青山 卓史 教授

共同研究 ステーション長



渡辺 宏 教授

所長退任にあたって

化学研究所 前所長 佐藤 直樹



平成24年4月から二期三年の所長任期が何とか満了できてからこのような記事の執筆を仰せつかるものと思っていましたが、図らずも再任(任期1年)の半ばで退任させていただくことになり、それにより所内外の皆様にご迷惑をお掛けしてしまったことについてまずお詫びを申し上げます。

また、10月から財務・施設・環境安全保健担当の理事・副学長に異動した後も、1年半、引き続き分子集合解析研究領域と理学研究科化学専攻の協力講座の担当をお認めくださった山極総長、化学研究所、理学研究科・化学専攻に感謝いたします。

所長在任中の二年半を振り返ると、一年目に6年ぶりの化研外部評価、二年目に共同利用・共同研究拠点中間評価を受け、それぞれ高く評価していただいたことが思い出されます。これは、力量ある研究者集

団からなる化学関連多分野共同体として、卓越素材のオンデマンド創製と精密機能解析などを軸として先端・融合・開拓的研究を展開する化学研究所が、その成果を教育・人材育成にも還元しつつ国内外の研究者コミュニティや社会への多元的貢献に努めている証であり、何より化研構成員の日々の努力の結果との認識を新たにしています。

大学、そして附置研究所を取り巻く状況は予断を許しませんが、急遽再登板をお願いすることになった時任所長の下、それぞれの目標に向けつつ全構成員が宇治地区事務局も含め丸となってさらに力を尽くせば、化研がより一層、その存在意義・存在感を増すに違いありません。皆様には、これまでのご高配に感謝するとともに、今後のご健闘を心から祈念させていただきます。

ICR
News

化研らしい融合的・開拓的研究

「化研らしい融合的・開拓的研究」は、若手研究者の融合的研究を促進する目的で始まった化学研究所ならではの研究支援。平成26年に新しく採択された共同研究2件の概要を紹介する。

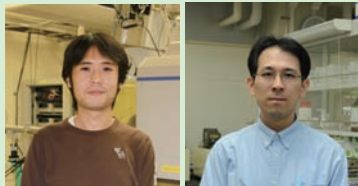
平成26年10月採択分

概要紹介

高輝度放射光を用いた機能性ポリマーブラシ修飾ナノ微粒子の薄膜形成機構の解明

- 複合基盤化学研究系 高分子物質科学 助教 小川 紘樹(左)
- 元 材料機能化学研究系 高分子材料設計化学 特定助教 石毛 亮平(右)
(現 東京工業大学 助教)

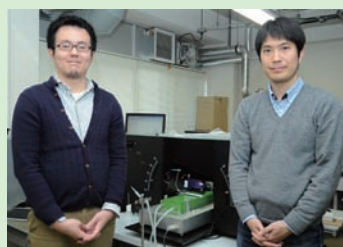
球状シリカ微粒子に高分子を高密度にグラフトしたポリマーブラシ付与ナノ微粒子は、ソフトなブラシ層間に働く斥力相互作用により自発的に結晶化する性質が注目されています。周期構造を利用した応用のみならず、高分子・界面・コロイド科学など多岐にわたる学術領域への波及効果が期待されています。本研究では、このナノ微粒子(分子設計・合成:石毛担当)を標的として、この分散液の膜形成過程での秩序化過程を放射光視斜角入射小角X線散乱法によるその場測定(実験・解析:小川担当)により解明することを目的とします。



自己組織化単層膜被覆金ナノ粒子触媒における異常加速現象の解明

- 元素科学国際研究センター 典型元素機能化学 助教 磯崎 勝弘(右)
- 環境物質化学研究系 分子環境解析化学 助教 下赤 卓史(左)

最近、我々は従来の触媒毒の概念に反し、金ナノ粒子を自己組織化単層膜で被覆することで、シランのアルコールシス反応における触媒活性が高くなることを見出しました。このような異常加速現象はこれまでに知られておらず、そのメカニズムを解明できれば新たな触媒設計指針を提供することができます。本研究では、反応過程における金ナノ粒子表面の分子構造および自己組織化単層膜の構造解析により異常加速現象の解明を目指します。

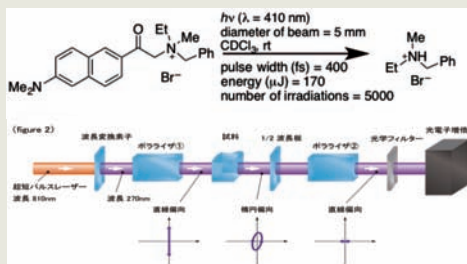


平成25年10月に採択された6件の共同研究の内容と成果を報告する。

平成25年10月採択分 成果報告

仮想的超短寿命キラル分子の検出

アミノ酸や糖類は、意図的な操作(化学反応等)をしない限り安定なキラリティーを持っています。そのためその光学特性を測定することが可能です。一方で、構造上はキラリティーを持つことが分かっていても極めて短時間でラセミ化する分子は、キラル分子としての光学特性を測定することができません。しかし、超短パルスレーザー光源を用いることでこのようなキラル分子の検出が可能と考え実験を展開してきました。その結果、アンモニウム塩のパルスレーザー分解と短寿命キラル分子の測定に必要な特殊CD(円二色性)測定装置の開発に成功しました。短寿命キラル分子のCD測定を行うべく、今後も研究を展開していきたいと思っています。



パルスレーザーによるアンモニウム塩の分解(上式)と特殊CD検出器の概要図(下図)



研究を終えて

助教 吉村 智之(左)

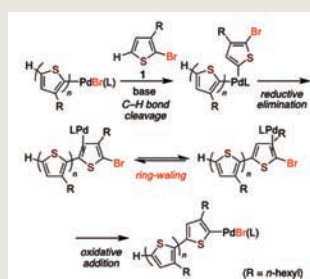
● 物質創製化学研究系 精密有機合成化学
余り触れることのない異分野の研究に携わって、大変有意義な共同研究でした。本研究で学んだことを自身の研究に役立てたいと思います。

助教 井上 峻介(右)

● 先端ビームナノ科学センターレーザー物質科学
全く異なる分野の研究内容や手法に直に触れることができ、化学研究所の懐の深さを実感しました。今後も本研究を発展させていきたいと思っています。

直接的アリール化重合による π 共役系高分子の一次構造制御合成法の開発:実験・理論の融合型アプローチ

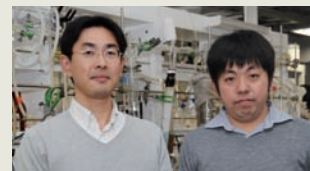
ポリ(3-ヘキシルチオフェン)(P3HT)に代表される π 共役系高分子は、優れた光電子材料特性を示し、その特性は一次構造(分子量、末端構造等)に強く依存します。本研究では、 π 共役系高分子の原子効率・環境調和性に優れた合成法であるパラジウム触媒直接的アリール化重合について、その重合機構を実験と理論の研究者が協力して理解を進め、一次構造制御法の確立へと展開することを目的としました。



チオフェン1の直接的アリール化重合の推定反応機構

2-ブロモ-3-ヘキシルチオフェン(1)の重合について精査したところ、用いる配位子によって重合機構が変化することを見出しました。P(C₆H₄-o-NMe₂)₃を用いた場合には、触媒がポリマー鎖から解離せず生長末端に分子内移動するring-walkingの寄与があるために、通常のコップ重合とは異なり生成P3HTの分子量が1の転化率に比例して増加することが明らかとなりました。現在は得られた知見を基に、一次構造制御法の確立を目指して検討を行っています。

2-ブロモ-3-ヘキシルチオフェン(1)の重合について精査したところ、用いる配位子によって重合機構が変化することを見出しました。P(C₆H₄-o-NMe₂)₃を用いた場合には、触媒がポリマー鎖から解離せず生長末端に分子内移動するring-walkingの寄与があるために、通常のコップ重合とは異なり生成P3HTの分子量が1の転化率に比例して増加することが明らかとなりました。現在は得られた知見を基に、一次構造制御法の確立を目指して検討を行っています。



研究を終えて

助教 脇岡 正幸(右)

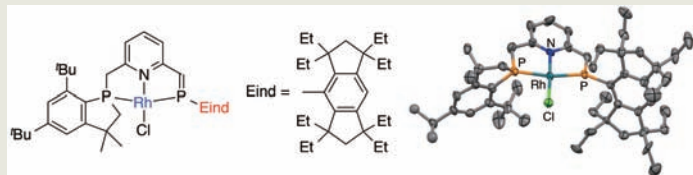
● 元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学
お互いに異なった視点から議論することで、大幅に研究が進展しました。本融合研究の成果を活かし、一次構造制御法の確立を目指して検討を続けたいと思います。

准教授 後藤 淳(左)

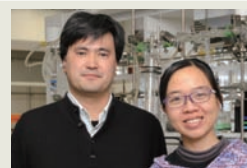
● 環境物質化学研究系 分子材料化学
化研という連携のしやすい恵まれた環境のもと、それぞれの得意とする分野をうまく融合して、反応の正体に近づくことができました。研究の今後の深化と展開が楽しみです。

Synthesis and Applications of Non-Innocent PNP-Pincer Type Phosphaalkene Ligands

ピリジンの2,6位にホスホニルメチル基とホスファエチニル基を持つPNPピンサー型ホスファアルケン配位子(PPEP)を有するIr錯体は、配位子の芳香族化・脱芳香族化を伴った金属-配位子協同作用により、高い結合切断能と触媒活性を示します。一方、同族のRh錯体では、室温でホスファアルケンの保護基のMes*基がP=C二重結合に分子内でC-H付加するため、その単離は困難でした。本研究では、剛直な縮環構造を有するEind基を立体保護基として導入し、分子内C-H付加を抑制することで、PPEP-Rh錯体の合成を達成しました。現在は、PPEP-Rh錯体を用いた触媒反応に取り組んでいます。



Eind基を導入したPPEPを有するRh錯体



研究を終えて

元研究員 林 雅凡(中央)

● 元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学 (現国立台湾大学化学科研究員)
During the collaboration, we spent time thinking, doing and discussing. It was so wonderful I can learn chemistry from other chemists and built a beautiful friendship through this team.

助教 竹内 勝彦(右)

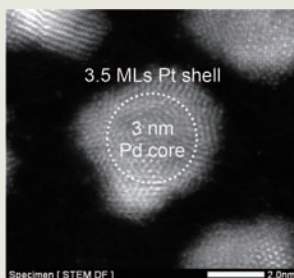
● 元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学
林さんから引き継いで研究を行い、無事目的錯体の合成・単離を達成できました。今後は、この成果をPPEP-Rh錯体を用いた触媒反応開発につなげられたらと思います。

准教授 笹森 貴裕(左)

● 物質創製化学研究系 有機元素化学
主に分子設計と反応提案で参画させていただいた融合的研究でしたが、実験結果のディスカッションを通じて、多くの新しい知識を得ることができました。今後の研究展開に向けて、大きなきっかけを得ることができました。

高性能低白金コアシェル型ナノ粒子触媒： ナノ構造の精密制御と精密構造解析

白金ナノ粒子触媒は、排ガス浄化や燃料電池などの種々のエネルギー関連技術を支える重要な材料であり、稀少で高価な白金の使用量を最小限に抑えること（低白金化）が喫緊の課題となっています。本研究では、触媒反応に関与しない白金ナノ粒子の内部を、他の金属で置換したコアシェル構造に着目し、最小限の白金が最大限の効力を発揮し得るナノ構造について検討を行いました。その結果、白金シェルのseed-mediatedエピタキシャル成長による単分散コアシェル型ナノ粒子の合成法を確立し、シェルの厚さを原子層オーダーで精密に制御すると共に、高い割合で高指数面を表面に露出した新奇コアシェル構造の創出に成功しました。表面エネルギーの大きな高指数面は熱力学的に不安定なため、通常は露出しにくく、多くの触媒反応で高い活性を示すことが期待されます。



3 nm Pdナノ粒子表面に3.5層のPt原子層が成長したコアシェル型ナノ粒子のHAADF-STEM像

研究を終えて

助教 佐藤 良太 (左)

● 物質創製化学研究系 精密無機合成化学
多様性と調和に富んだ化研の特長を最大限に活用し、効率的に効果的な成果を得ることができました。本助成に感謝すると共に、更なる連携と発展を図ります。

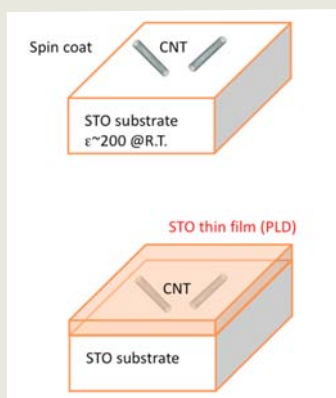
助教 治田 充貴 (右)

● 先端ビームナノ科学センター 複合ナノ解析化学
異分野の研究に携わることで、それに対応した私自身の専門の幅も広げることができました。



高誘電率材料の誘電遮蔽効果を利用したナノ構造物質の光学特性制御

ナノ物質は大きな表面積/体積比を有していることから、その光学特性は周囲の環境に敏感である。特に、ナノ物質を高誘電率材料で囲むと、光励起によって生成する電子と正孔間に働くクーロン相互作用が周囲の誘電率によって遮蔽されることで、大きな光学特性の変化が期待される。本研究ではカーボンナノチューブや半導体ナノ粒子を高い誘電率をもつチタン酸ストロンチウム基板上に分散し、その上からチタン酸ストロンチウムを製膜することで、高誘電率材料に挟まれたナノ物質を作製した。空間分解発光分光を用い、誘電遮蔽効果によって光学特性に大きな変化が現れることを実証した。



試料の概念図。SrTiO₃ (STO) 基板上にスピコートしたナノ物質（ここではカーボンナノチューブ: CNT）の上に、パルスレーザー堆積法によりSTO薄膜を製膜することで、高誘電率材料中にナノ物質を閉じ込める。

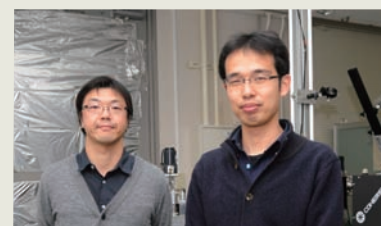
研究を終えて

特定准教授 山田 泰裕 (右)

● 寄附研究部門 ナノ界面光機能
結果的には多くの課題が残りましたが、野心的で面白いテーマであり、楽しく研究ができました。

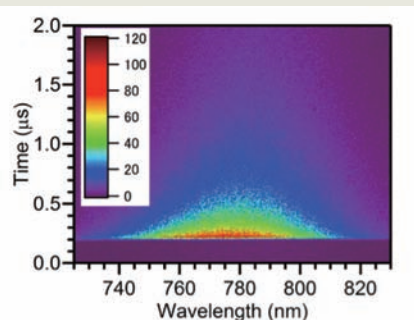
准教授 菅 大介 (左)

● 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学
日頃の研究では扱うことのない材料について学ぶ良い機会であり、自身の研究の幅が広がりました。



Investigation of Photocarrier Dynamics in Perovskite-based Solar Cells

Practical applications of solar cells based on the novel organo-lead halide perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{and I}$) materials are expected to be realized soon as the power conversion efficiency of perovskite-based solar cells has been boosted up to 20%. However, it is believed that further improvement of the solar cells' performance is achievable if more insightful understandings of optoelectronic properties of the perovskite absorber that governs the photovoltaic operation of solar cells are revealed. We clarified for the first time the photocarrier dynamics in $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ bulk crystals. We pointed out the physics behind the high conversion efficiency observed in perovskite-based solar cells. Our findings might provide useful directions for designing thin-film perovskite-based solar cells with the higher efficiencies.



Two-dimensional contour image of time-resolved PL spectra of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ bulk crystals.

研究を終えて

研究員 LE Quang Phuong (右より2人目)

● 元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学

The ICR special grant facilitated an efficient corporation among researchers in different fields and encouraged them together to work on the current hot topics in science and technology.

准教授 若宮 淳志 (左)

● 物質創製化学研究系 構造有機化学

「融合的研究の推進が可能」という化研の特徴を活かして、今後ともペロブスカイト太陽電池分野をリードできる研究に取り組んでいきたいと思っています。

特定准教授 山田 泰裕 (右)

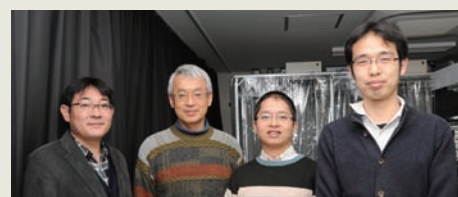
● 寄附研究部門 ナノ界面光機能

ペロブスカイト太陽電池の研究はまさに日進月歩です。今後も積極的に研究を進めていきたいと思っています。

教授 金光 義彦 (左より2人目)

● 元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学

隣の研究室ですので、日頃から廊下で活発な議論を行うことができ、素晴らしい成果に結びつきました。



共同利用・共同研究拠点 2014年 活動報告

化学研究所は、「化学関連分野の深化・連携を基軸とする先端・学際研究拠点」として共同利用・共同研究拠点活動を推進しています。化学研究所の特徴である研究分野の広がりや深さ、これまでの連携実績を活かし、先端・学際共同利用・共同研究を進め、より多様でグローバルな化学研究の展開を図っています。2014年は、6件の国際会議、4件のシンポジウム／研究会を開催し、多くの研究者が議論を交わす場を提供しました。

国際会議

3月10日～12日

化学研究所国際シンポジウム2014 「スマートマテリアルの科学と技術」

The ICR International Symposium 2014 (ICRIS'14):
The Science and Technology of Smart Materials

主催:京都大学化学研究所 **共催:**京都大学エネルギー理工学研究所、
京都大学生存圏研究所、京都大学化学研究所 共同利用・共同研究拠点
於:京都大学宇治おうばくプラザ **参加人数:**381名
組織委員長:化学研究所 所長 佐藤 直樹
世話人:材料機能化学研究系 高分子材料設計化学 教授 辻井 敬巨

若手研究者国際交流と新分野開拓の視点で、本学全学経費の支援を受けて開催した。ノーベル化学賞受賞者の鈴木章先生の特別

講演、国内外から21件の基調・招待講演、91件のポスター発表が行われ、高度な議論が展開された。パンケットには、山本正宇治市長、江崎信芳京都大学理事も駆けつけて下さり、化学研究所への期待も述べられた。予想を大幅に上回る参加者を得て、この分野への関心の高さを感じられる有意義なシンポジウムとなった。



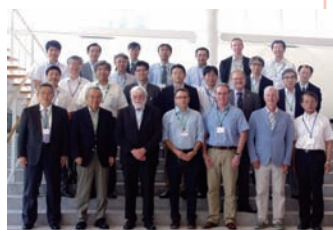
7月10日～11日

第4回統合物質国際シンポジウム (兼)ICOMC2014京都プレシンポジウム

The 4th International Conference on MEXT Project of
Integrated Research on Chemical Synthesis &
ICOMC 2014 Pre-symposium in Kyoto

主催:文部科学省特別経費統合物質創製化学推進事業
共催:京都大学化学研究所 共同利用・共同研究拠点、
ICOMC2014組織委員会、新学術領域研究「感応性化学種」総括班
於:京都大学宇治おうばくプラザ **参加人数:**162名
世話人:元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学 教授 小澤 文幸

先導的物質合成のための新学術基盤の構築を目的とする標題事業の第4回国際シンポジウムが開催された。オーラルセッションでは、フランス・イギリス・ドイツ(2名)・カナダ・日本(2名)の著名研究者による7件の招待講演と、本事業に参加する北大・名大・京大・九大から各2件の研究発表が行われた。また、ポスターセッションでは79件の発表が行われた。160名を超える参加者を集め、終始盛況のうちに会は終了した。



9月28日～10月1日

「流動と変形に誘起される高分子結晶化」 繊維の科学と技術に関する国際シンポジウム, ISF2014 Flow and Deformation Induced Polymer Crystallization: International Symposium of Fiber Science and Technology (ISF2014)

主催:京都大学化学研究所 **共催:**繊維学会、東洋紡株式会社
於:ビッグサイトTFTホール **参加人数:**70名
世話人:複合基盤化学研究系 高分子物質科学 教授 金谷 利治、
東洋紡株式会社 村瀬 浩貴

流動場や変形の場における高分子の結晶化は繊維科学の基礎をなす。本会議は、繊維学会70周年を記念して開催された繊維の科学と技術に関する国際シンポジウム(ISF2014)の特別セッション

S3として開催された。海外から5名、日本から5名の招待講演者を迎え、約70名の参加者を得た。この分野の最新のトピックスが取り上げられ、非常に熱い議論が展開された。



10月2日～3日

高分子結晶に関するICRシンポジウム 2014 (ICRSPC2014) ICR Symposium on Polymer Crystals 2014 (ICRSPC2014)

主催:京都大学化学研究所 **共催:**山形大学、東洋紡株式会社
於:メルパルク京都 **参加人数:**30名
世話人:複合基盤化学研究系 高分子物質科学 教授 金谷 利治、山形
大学大学院理工学研究科 准教授 松葉 豪、東洋紡株式会社 村瀬 浩貴

高分子結晶化は学問的にも産業的にも重要であり、多くの会議が開催されている。本会議では高分子結晶化の最近の進歩と問題点を議論するために、海外からの3名を含む14名の招待講演者による講演、さらに12件のポスター発表を行い、有意義な議論が活発に行われた。



10月4日～5日

化学研究所国際NMRシンポジウム2014: 固体NMR技術の最前線 日仏ワークショップ ICRIS-NMR'14: Technological Frontiers in Solid-State NMR — A French-Japanese Workshop —

主催: 京都大学化学研究所

共催: 京都大学化学研究所 共同利用・共同研究拠点、核磁気共鳴学会、高分子学会、University of Orléans and CNRS, France

於: 京都大学化学研究所 共同研究棟大セミナー室 参加人数: 50名

組織委員長: 化学研究所 所長 時任 宣博

世話人: 環境物質化学研究系 分子材料化学 教授 梶 弘典

固体NMRの技術はever-growingであり、現在もさかんに新たなコンセプトに基づいた研究・開発が進められている。今回、ICRISの分科シンポジウムとして、固体NMRに関する会を開催した。学生のための固体NMRの基礎に関する講義に始まり、最先端プローブ開発、測定法、また、最新の固体NMRアプリケーションに関する講演が行われた。フランス、日本を中心とした限られたメンバーでの会とすることにより議論を深めることを目的としたが、実際に各所で共同研究の話も持ち上がり、有意義なイベントとなった。フランス側のオーガナイザーが極めて積極的で、2年後はフランス、4年後は日本で開催することを約束し、閉会となった。



10月19日～21日

曲面状有機 π 電子系化合物の合成と応用に関する国際シンポジウム International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic π -Molecules and Materials (CURO- π)

主催: (独) 科学技術振興機構 共催: 京都大学教育研究振興財団、京都大学化学研究所、東北大学原子分子材料科学高等研究機構、内藤財団

於: 京都大学宇治おおばくプラザ 参加人数: 139名

組織委員長: 材料機能化学研究系 高分子制御合成 教授 山子 茂

本シンポジウムは、近年の研究進展が著しい曲面構造を持つ有機 π 電子系化合物の合成と物性を主題とする初めての会議である。キーノート講演1件、招待講演20件、ポスター発表57件の発表があり、いずれの発表においても活発な議論が行われた。曲面をキーワードに、様々な興味深い構造と物性を持つ分子が紹介され、当該分野の学問分野の広がりとならざる可能性が見出された。第二回目の会議を2016年に米国にて開催することが決定され、本分野が益々発展していくことが期待される。



シンポジウム／研究会

1月29日

ペロブスカイト構造物質研究会 Workshop on Materials with Perovskite Structure

主催: 京都大学化学研究所 於: 京都大学化学研究所 総合研究実験棟セミナー室 (CB-215/217) 参加人数: 30名

世話人: 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学 教授 島川 祐一、特定助教 市川 能也

高輝度光科学研究センターの水牧仁一朗氏を研究代表者として行っている本共同利用研究では、放射光を駆使して主に遷移金属酸化物の結晶構造や電子状態を解明する国際共同研究を進めてきた。今回は「ペロブスカイト構造物質」をキーワードに有機・無機の研究者が一堂に会してミニワークショップを開催した。無機ペロブスカイト構造酸化物の示す興味深い物性の最新の進展と、高効率な太陽電池材料として最近非常に注目されている有機分子を含んだペロブスカイト型物質の最前線が紹介された。「ペロブスカイト構造物質」の奥深さを感じた研究会となった。



9月18日

京都大学化学研究所高分子物理学 ワークショップ 2014

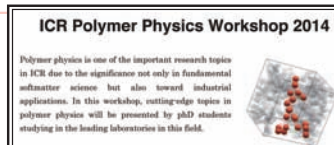
ICR Polymer Physics Workshop 2014

主催: 京都大学化学研究所

於: 京都大学化学研究所 本館5階会議室 (N-531C) 参加人数: 20名

世話人: 複合基盤化学研究系 分子レオロジー 准教授 増淵 雄一

高分子物理学は基礎学問としての重要性および高分子材料開発の基盤技術としての有用性から、長年にわたって本研究所の重要な研究テーマの一つに数えられている。また本研究所は本分野の国際的拠点の一つとして知られ、各国からの研究者や大学院生の滞在を受け入れている。本年度はアメリカ、ドイツからの博士課程学生を講師とした国際ワークショップを開催した。



10月28日

先端ビームナノ科学センター 「ビーム科学・高エネルギー科学」講演会 Lectures on Beam Science and High Energy Science

主催: 京都大学化学研究所 先端ビームナノ科学センター

共催: 京都大学化学研究所 共同利用・共同研究拠点

於: 京都大学化学研究所 共同研究棟大セミナー室 参加人数: 50名

世話人: 先端ビームナノ科学センター 構造分子生物科学 教授 畑 安雄、レーザー物質科学 教授 阪部 周二

我が国の量子ビーム科学、放射線科学、高エネルギー科学などの最先端の動向と将来展望に関する情報交換を目的とし、各分野の第一人者6名を講師として招いて実施された。講演は「加速器科学」、「素粒子・核物理」、「アト秒科学とレーザー科学」、「量子ビームの医学・生物学応用」、「高エネルギー密度科学」、「小型加速器中性子源」の現状動向と将来展望など多岐に渡り、当該分野の将来性と分野横断型新規共同研究開拓の可能性を感じさせる内容であった。



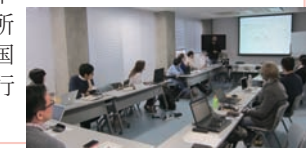
11月17日

バイオインフォマティクスに関するKUBIC-NII 合同セミナー 2014 KUBIC-NII Joint Seminar on Bioinformatics 2014

主催: 京都大学化学研究所、国立情報学研究所 於: 京都大学化学研究所 総合研究実験棟セミナー室 (CB-316) 参加人数: 16名

世話人: バイオインフォマティクスセンター 数理生物情報 教授 阿久津 達也

バイオインフォマティクス(生命情報学)における数理的アプローチに関する国立情報学研究所と共同の研究会を今年も開催した。小規模ながらもフランス(2名)、ドイツ、中国の研究者、さらに、日本の研究所に所属する外国人研究者数名も参加する国際的なイベントとなり、活発な議論が行われた。



報道記録2014

化学研究所に関連した報道記録をご紹介します

報道月日		見出し	備 考
◆◆ 1月	4日 京都新聞 朝刊	右書き看板は町の歴史資料 宇治の京大名誉教授 撮影しHP掲載 和菓子 漬物の老舗など150点	新庄 輝也 名誉教授
	13日 読賣新聞 朝刊	炭素と水素 楕円球状に合成 京大グループ 新分子製造 超薄型モニターなど利用も	山子 茂 教授
	21日 日刊工業新聞	酸化チタン光触媒 可視光で活性化 物材機構 京大 水素製造に応用も	磯崎 勝弘 助教
	化学工業日報	配列金ナノ粒子に担持 高活性の可視光型光触媒	
	23日 日刊産業新聞	酸化チタン光触媒 ナノテク利用し可視光で活性化	
	31日 日刊工業新聞	「ナノ炭素リング」合成 京大 有機ナノ電子材に応用	山子 茂 教授
◆◆ 2月	7日 科学新聞	可視光で活性化 光触媒材料開発 ナノテク利用で成功	磯崎 勝弘 助教
	22日 京都新聞 朝刊	炭素分子で世界最小リング合成 京大グループ 太陽電池の素材、応用に期待	山子 茂 教授
	28日 京都新聞 朝刊	ソフィア京都新聞文化会議 人はなぜ山に登るのか	左右田 健次 名誉教授
◆◆ 3月	7日 京都新聞 朝刊	光らせてiPS選別 京大発見 移植応用に期待 安価で簡便な手法	上杉 志成 教授
	11日 日本経済新聞 朝刊	Science&Tech.フラッシュ iPS細胞だけ光らせる化合物	
	14日 科学新聞	中間バンド型太陽電池 光学的・電気的特性を解明 京大化研・豊田工大グループ	金光 義彦 教授 アックス アイビッド 研究員ら
	26日 日刊工業新聞	溶けやすい骨格開発 京大 太陽電池・有機EL向け有機材 平面構造で電荷移動容易	若宮 淳志 准教授 佐藤 基さん 村田 靖次郎 教授ら
◆◆ 4月	5日 読賣新聞 朝刊	「重合」で役立つ素材を 京都大学附置研・センター第9回シンポ 仙台講演会 京都からの提言～21世紀の日本を考える 社会と科学者	山子 茂 教授
◆◆ 5月	1日 日刊工業新聞	固体状態で分子配列密に 高い電荷輸送特性 京大が有機半導体材料	若宮 淳志 准教授 西村 秀隆さん 村田 靖次郎 教授 梶 弘典 教授ら
	2日 文教速報	京大化研が国際シンポジウムを開催	
	12日 日刊工業新聞	キラリ研究開発 第143回・「伝導体」の謎を解く!低エネルギー逆光電子分光法(前編)	吉田 弘幸 助教
	18日 京都新聞 朝刊	出版あれこれ 理系研究者になるために必要なこと 京大教授らが「哲学」も説く	長谷川 健 教授
	19日 日刊工業新聞	キラリ研究開発 第144回・「伝導体」の謎を解く!低エネルギー逆光電子分光法(後編)	吉田 弘幸 助教
	23日 日刊工業新聞	高い磁気転移温度・電子スピン方向 「ハーフメタル」合成 京大など	島川 祐一 教授
◆◆ 6月	13日 科学新聞	高い磁気転移温度のハーフメタル新材料 日英グループが合成成功	島川 祐一 教授
	23日 京都新聞 朝刊	ベンチャーGOGO! ビッグデータで香り解析	馬見塚 拓 教授
	24日 朝日新聞 朝刊	次期総長、外部にも資格広げたが 京大 6人全員学内候補	佐藤 直樹 教授
	28日 京都新聞 朝刊	300度でも巨大磁気抵抗効果 金属酸化物開発、高密度HDに応用期待	島川 祐一 教授
◆◆ 7月	8日 京都新聞 夕刊	京大オンライン講座 海外の優秀者招待	上杉 志成 教授
	朝日新聞 夕刊	ネット講座 優秀生徒招待 京大「ムーク」	
	9日 読賣新聞 朝刊	ネット授業優秀6人招待 17歳「もっと勉強したい」	
	24日 日本経済新聞 朝刊	キャンパス発この一品 皮膚細胞を活性化させる コラーゲン生成促す化粧水-京都大	平竹 潤 教授
◆◆ 8月	20日 日刊工業新聞	ペロブスカイト半導体中の電子状態を解明	金光 義彦 教授 若宮 淳志 准教授 山田 泰裕 特定准教授 遠藤 克 研究員ら
◆◆ 9月	16日 京都新聞 夕刊	無料ネット講義人気 京の大学 アップ続々 京大、世界2万人が受講 課題提出で修了証	上杉 志成 教授
◆◆ 10月	1日 京都新聞 朝刊	新所長に時任教授	時任 宣博 教授
	読賣新聞 朝刊	京大人事	
	15日 FM京都 α-STATION SUNNYSIDE BALCONY	分子レベルで“ものづくり”を可能にする化学	村田 靖次郎 教授
	18日 リビング京都東南	フッ素化合物などについて解説 京都大学 化学研究所公開講演会	
	22日 日刊工業新聞	拓く研究人 ペロブスカイト太陽電池 効率化	若宮 淳志 准教授
◆◆ 11月	7日 科学新聞	学術賞と研究助成金 松尾財団が贈呈式	井上 峻介 助教
	11日 化学工業日報	ペロブスカイト太陽電池 塗布で変換効率10%超 東京化成 ヨウ化鉛精製品発売	若宮 淳志 准教授
	27日 朝日新聞 朝刊	基盤に塗るだけ 新型太陽電池 曲げる・半透明化 自在に	山田 泰裕 特定准教授
◆◆ 12月	8日 日刊工業新聞	海中の銅同位体比 精密測定に成功 海洋機構と京大	高野 祥太郎 さん
	21日 京都新聞 朝刊	出版あれこれ 宇宙の誕生から人類の台頭まで	宗林 由樹 教授

研究 ハイライト

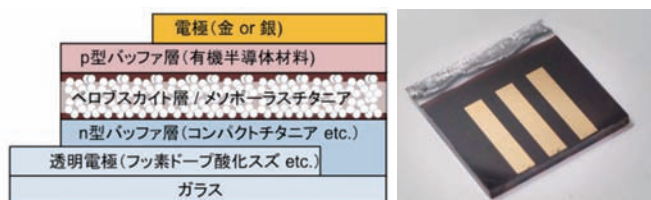
有機—無機ハイブリッド型太陽電池

「新しいことにどんどん取り組みましょう!」と村田靖次郎教授に背中を押されて開始した研究は、太陽電池の性能を飛躍的に向上させるための鍵となる、ヨウ化鉛(PbI_2)を精製する独自の手法を導きだした。精製した PbI_2 は、2014年10月に国内試薬メーカーから販売が開始され、製造が追いつかない程、注文が殺到している。化学への探究心をつきつめる。社会に還元できるものを作る。若宮准教授は一環した姿勢で研究に挑み続ける。

物質創製化学研究系 構造有機化学

准教授 若宮 淳志

太陽光エネルギーを電気エネルギーに変換する太陽電池は、再生可能エネルギー創出の最も有望な技術の一つであり、安価で高性能な太陽電池の開発は人類が抱えるエネルギー問題の解決の鍵を握っているといっても過言ではありません。近年、太陽電池の研究分野では、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ などの鉛ハライド型ペロブスカイトを光吸収材料に用いた太陽電池が急速に注目を集めています。この太陽電池は、材料の溶液を塗って作製することができ、インクジェットプリンターのような印刷技術を用いて、低コストで作製可能な次世代型の太陽電池として期待されています。2012年に10%を越える光電変換効率が報告され、世界中でその高効率化競争が活発化している状況にあります。このペロブスカイト型太陽電池は、色素増感型太陽電池や有機薄膜太陽電池といった有機太陽電池とよく似た素子構造をもちます。私たちはこれまで、JSTのさきがけ研究として、これら有機太陽電池研究に取り組んできました。この経緯から、無機材料にも躊躇することなく、遠藤 克君(統合物質創製化学推進事業 博士研究員)とともに、このペロブスカイト型太陽電池研究を開始しました。

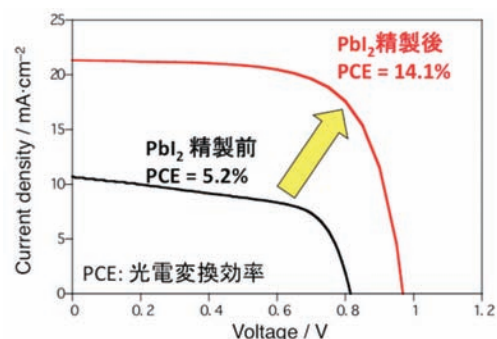
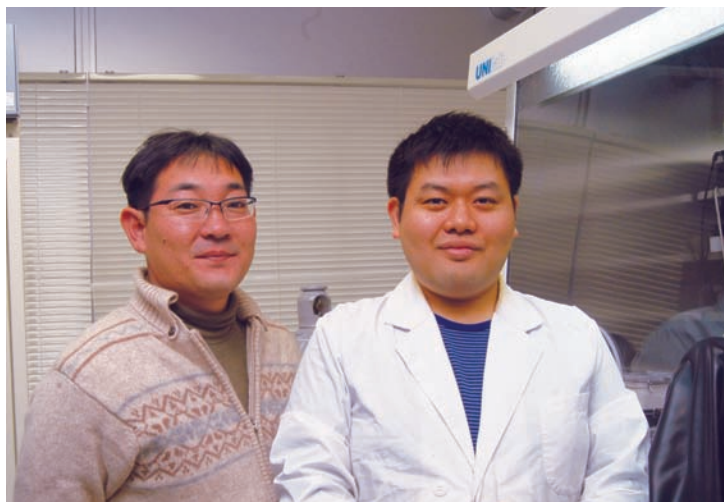


ペロブスカイト型太陽電池

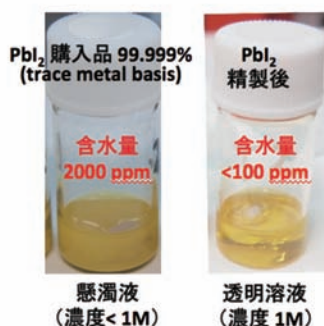
研究を開始した当時は、12%の光電変換効率が報告されている一方で、同じように作製しても、太陽電池はセル間でも性能にバラツキが大きく、時には全く発電しない場合もあるような状況でした。光電変換効率の向上を目指した新しい材料開発研究や、発電のメカニズムなど

の物性解明研究を行うためにも、まずは、再現性よく高効率太陽電池を作製する技術の確立が強く求められていました。そこで私たちは、用いる材料の純度と生成する中間体の構造特性の解明という観点から、この太陽電池の作製法の検討を行いました。私たちの一つ目の重要な発見は、ペロブスカイト層の材料として用いるヨウ化鉛(PbI_2)の精製が太陽電池の性能に大きく影響を及ぼすということでした。99.999% (trace metal basis)として販売されている PbI_2 を用いても、ロットによっては溶媒には70℃でも1 Mの濃度では溶けきらず、得られた薄い溶液を用いて太陽電池を作製した場合、その光電変換効率は5%程度にとどまりました。カールフィッシャー法により、この PbI_2 の含水量を測定したところ、2000 ppmもの水を含むことが分かりました。この試薬の含水量は、独自に開発した精製法(特許出願)により100 ppm程度に下げることができ、これにより1 Mの透明な N,N -ジメチルホルムアミド(DMF)溶液を速やかに調整できることが分かりました。この溶液を用いて、太陽電池を作製することで、光電変換効率は再現性よく14%を越えるようになってきました。我々の手法を用いて精製した PbI_2 は国内の試薬メーカーより2014年10月末から販売が開始されています。もう一つの私たちの発見は、ペロブスカイト作製の中間体として得られる錯体の構造特性でした。化研の笹森 貴裕先生、時任宣博先生にお願いして、 PbI_2 のDMF溶液から得られた単結晶に対してX線結晶構造解析を行った結果、Pbに溶媒のDMFが一分子配位した $\text{PbI}_2 \cdot \text{DMF}$ 錯体であることが明らかになりました。この錯体の熱分析結果を基に、 PbI_2 の溶液を塗布した基盤の加熱乾燥温度と時間を最適化することで、セル内の均一性にも優れた高効率太陽電池が作製できることを見出しました(Chem. Lett.,

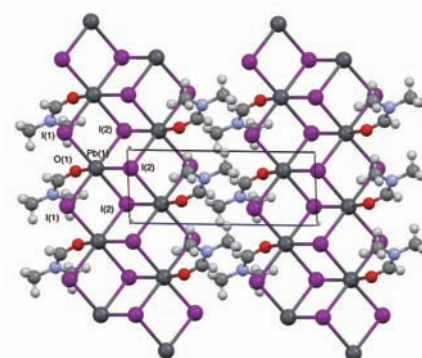
若宮 淳志 准教授(左)と遠藤 克 研究員(右)。市販のヨウ化鉛(PbI_2)は、99.999%とはほぼ完璧に精製されている。その残りの0.001%はどうなっているかと疑問を抱いたことが、研究を大きく変えた。極微量の水分量を測定する方法を見出したのは遠藤研究員だ。遠藤研究員に若宮准教授の印象を尋ねると、「常に理想が頭にあって、妥協を許さない。こちらが少しでも手を抜こうとすると、すぐに見抜いて叱ってくれる」という答えが返ってきた。「きちんと言葉で伝えることを大切にしています。僕の言葉を受け入れるだけでなく、跳ね返すような反応をしてくれる時に、良い結果が出るんです」。研究にも後進の指導にもアツい若宮准教授らしい言葉である。



ペロブスカイト型太陽電池の特性: 短絡電流密度-開放電圧曲線



PbI_2 の含水量と有機溶媒への溶解性の違い



$\text{PbI}_2 \cdot \text{DMF}$ 錯体のX線結晶構造

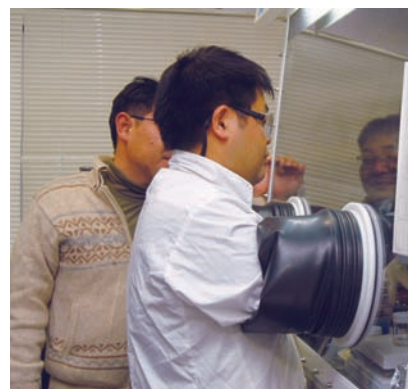
2014, **43**, 711.)。

高効率化を目指したデバイス開発研究が急速に進む一方で、高い光電変換効率をもたらす鍵となる基礎的な物性の理解はほとんど得られていませんでした。特に、この太陽電池の最も本質的な物性の一つである「光によってペロブスカイト材料中に励起される電子の振る舞い」については未解明のままでした。そこで、上述の手法により作製した高純度のペロブスカイトの膜を用いて、化研の山田泰裕先生、金光義彦先生らにその光物性を詳細に検討していただきました。その結果、これまでは有機太陽電池材料のように電子と正孔が励起子と呼ばれる束縛状態を形成すると考えられてきましたが、実際には電子と正孔はそれぞれ自由に運動していることを初めて明らかにすることができました(*J. Am. Chem. Soc.* 2014, **136**, 11610.)。本成果は、今後、高効率太陽電池の素子構造を考える上でも極めて重要な知見であると注目されています(*J. Am. Chem. Soc. Spotlight* で紹介)。

さらに高い光電変換効率を達成するためには、生成した電荷を効率的に取り出すための有機半導体材料の開発も重要となってきます。最近、私たちは、化研の梶 弘典先生、福島達也先生らとの共同研究として、準平面型の

骨格を用いた独自の有機半導体材料の開発にも成功しています(*Angew. Chem. Int. Ed.* 2014, **53**, 5800.)。この分子設計概念を応用して開発した新材料を用いて太陽電池を作製したところ、従来の材料を凌駕する高い光電変換効率を得られることが分かってきています。今後もこの有機-無機ハイブリッド型太陽電池の高性能化に精力的に取り組んでいきたいと思います。

本研究は、「化研らしい融合的・開拓的研究」に助成頂き、化研の多くの先生方との共同研究で得られた成果であります。幅広い分野の研究者で構成される化研ならではの、まさにハイブリッド型の成果であると言えます。



企業に精製方法を伝授する役割を担っているのが遠藤研究員。企業で精製された PbI_2 は、再び遠藤研究員によって検品・評価された後、商品としてのラベルが貼られる。

研究 ハイライト

データマイニングによる生命科学へのアプローチ ～Broad-DREAM遺伝子エッセンシャルリティ 予測チャレンジ第1位を達成～

膨大なデータの中から役立つ可能性がある情報を見つけ、抽出するデータマイニング。

生命情報学の分野では、データマイニングを用い、より低コストに遺伝子の不可欠性を予測する試みがなされている。

烏山助教らは今回、国際的なデータ解析コンペティションで、より精度の高い予測モデルを作成し見事1位に輝いた。

バイオインフォマティクスセンター 生命知識工学

助教 烏山 昌幸

次世代シーケンサーを始めとする計測機器の発達により、DNA配列や遺伝子発現量などの生物学上の多様な情報が以前よりはるかに低コストで得られるようになりました。しかし、得られるデータが膨大なため、それらが意味するものを解釈したり、背後に潜むシステムの手がかりを得るには計算機による解析が必須となります。このようにデータから何か価値のあるものを発見するための計算科学的なアプローチは一般に「データマイニング」と呼ばれます。私たちのグループではデータマイニングによる生命科学情報の解析や汎用方法論の開発を行っています(図1)。

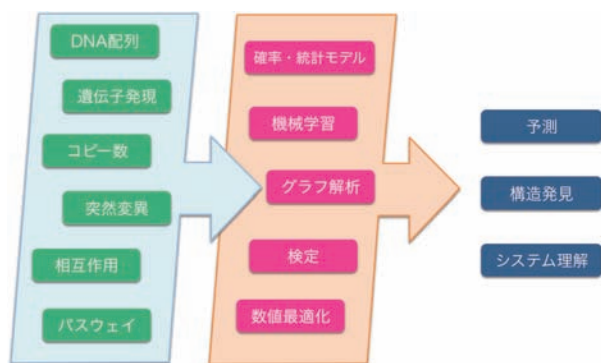


図1 様々な統計的手法を用いて、膨大なデータから有用な情報を引き出す。

ここでは最近のトピックスとして遺伝子エッセンシャルリティというデータの解析について紹介します。これはある特定の遺伝子が細胞の増殖にどの程度重要かを定量化したものです。具体的にはそれぞれの遺伝子をノックダウンしたときに、細胞の増殖にどの程度影響がでるかで計測されます。極端な場合、増殖が止まってしまったらその遺伝子はエッセンシャル、そうでなければエッセンシャルでないというわけです。特にがん細胞における遺伝子エッセンシャルリティの同定は標的遺伝子の特定にとって非常に重要です。ただし、実際に細胞株を培養するこの実

験は時間的・費用的コストが高く、また安定的な結果を得るのが難しいとされています。そこで、代わりに計算科学的なアプローチによってより低コストにエッセンシャルリティを予測できないかという課題が生まれています。

このような背景のもと、DREAM(Dialogue for Reverse Engineering Assessments and Methods)と呼ばれるシステムズバイオロジー分野で有名な国際データ解析コンペティションによって「遺伝子エッセンシャルリティ予測チャレンジ」という課題が提示されました。このチャレンジは、各細胞株ごとに約15,000種類の遺伝子エッセンシャルリティを同じ細胞株の遺伝子発現量やコピー数など、近年の機器の発達で比較的容易に計測できるようになった分子特徴から予測するモデルを構築し、世界中の参加者間でその予測精度を競うというものです(図2)。遺伝子の発現量やコピー数がエッセンシャルリティに関連していることは既に示唆されていましたが、膨大な数の遺伝子に対してどのような関連性があるのか実験的に調べることは困難です。そこでこのようなデータから依存関係を推定する問題が重要になってくるというわけです。

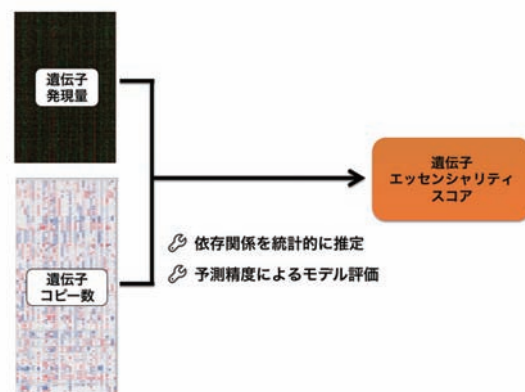
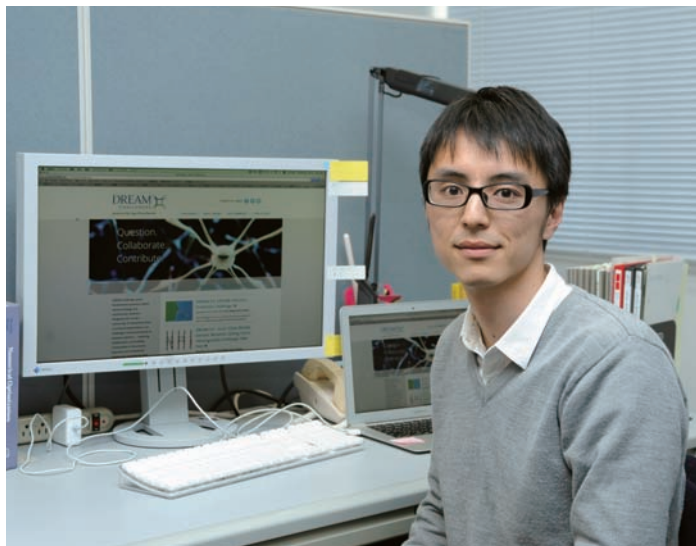


図2 ある一定数の細胞株についてエッセンシャルリティスコアと発現量、コピー数が与えられ、そこからモデルを推定します。推定されたモデルは発現量とコピー数のみが与えられた別の細胞株を使って評価され、その予測精度を競います。

「遺伝子エッセンシャルティ予測チャレンジ」ではデータが3回に分かれて送られてくる。そのデータごとに予測をして投稿すると主催者が結果を教えてくれるシステムだ。最初のデータに特化してモデルを作成してしまうと、最後の方で予測モデルの精度が安定しなくなってしまう。

「今回のコンペティションのような問題設定では、今あるデータだけでなく将来やってくるデータにもうまく適用できなければなりません。データが潜在的に共有している性質を統計モデルでうまく捉えられる様にバランスを調整するのが難しかったです」と今回の苦労を語る。



このような形の予測問題は統計科学ではよく研究されており、様々な手法を利用することができます。私たちはチャレンジの期間中、適用し得る色々なモデルを検討し、最終的には三つのサブチャレンジのうちの一つで参加者中最も良い予測精度を達成することに成功しました。我々のアプローチの特徴的な点は入力となる発現量・コピー数と出力となるエッセンシャルティの関係性のみならず、約15,000の異なる遺伝子のエッセンシャルティ間に内在する相関構造をモデルに組み込むことで精度の向上を達成したことです(図3)。このように解析対象のデータがどのような相関構造を持っているかを考慮し、それをどうモデル化するかはデータマイニング研究の一つの要点となります。

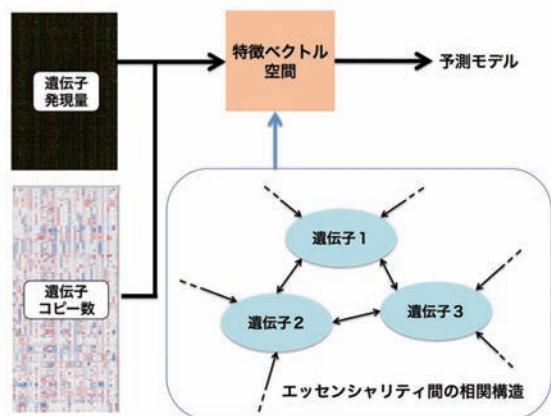


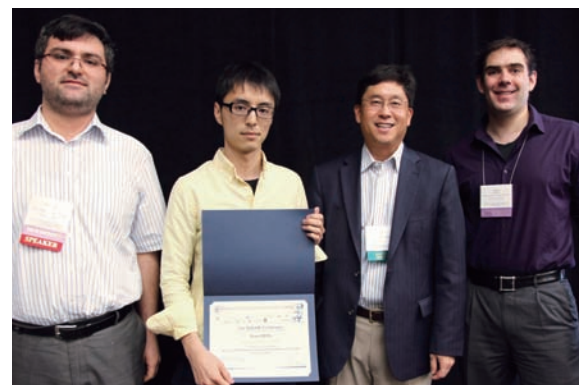
図3 予測システム概念図。エッセンシャルティ間の相関構造を埋め込んだ特徴ベクトルを抽出。

今回の成果についてはDREAM Challenge and Cytoscape Workshops 2014において勝利チームとして招待講演を行いました。このワークショップはバイオインフォマティクス分野でのトップ会議の一つであるRECOMB (Research in Computational Molecular Biology) との共催で行われたものです。

「学生の頃は生物学に限らない一般的なデータ解析手法についての研究をしていました。一つのフレームワークで色々なデータが扱える事に興味を持ったことが研究者を目指すきっかけの一つでした。生物学のデータは非常に複雑ですので解析の方法論が特に重要になってきます」。



今回のコンペに「チームBERL」として鳥山助教とともに参加した生命知識工学研究領域の馬見塚 拓教授。「現在日本では、バイオインフォマティクスや機械学習の分野の研究者は増えてきていますが、まだまだ数は少ないです。とくに機械学習に関して言えば、京大の中を探してもそう何人もいません。必然的に日本の中だけで研究していればよいという雰囲気ではなくなりますから、積極的に外の人と交流するというのが我々の研究室の特徴だと思います」。



2014年11月11日サンディエゴで行われたDREAM Challenge and Cytoscape Workshops 2014の表彰式にて。

若手研究ルポ

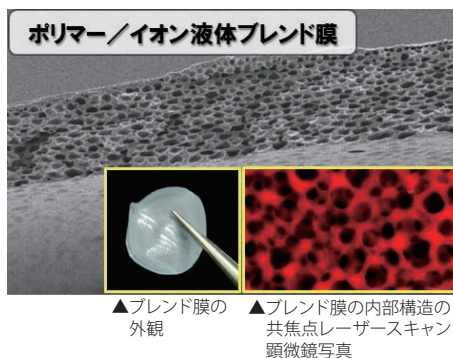
研究ピックアップ

ポリマー／イオン液体ブレンド膜の開発

高性能イオン伝導性材料の新領域開拓を目指して

材料機能化学研究系 高分子材料設計化学
准教授 大野 工司

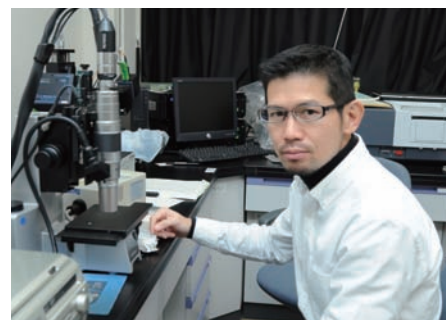
イオン伝導性材料は電気化学において鍵となる材料であり、古くから環境・エネルギー分野に深く関わっています。そして現在では、二次電池や燃料電池などのエネルギーデバイスにおける、発電および充放電の効率や、安全性および耐久性などの向上のために、高性能なイオン伝導性材料を開発することは国際的な競争下にあります。



▲ブレンド膜の外観 ▲ブレンド膜の内部構造の共焦点レーザーラマン顕微鏡写真

私たちの研究では、全く新しいタイプのポリマー／イオン液体ブレンド膜を創製する技術を革新的な「分子技術」として確立し、イオン伝導性材料に関する科学と技術に新領域を開拓することを目指しております。

本技術の主要なツールは、我々がこれまでに開発した、表面開始リビングラジカル重合法によるテラーメード型微粒子設計法です。本法により精密合成したポリマーブラシ付と複合微粒子を、本来は非相溶であるポリマーとイオン液体の混合系に少量添加すると、非常に興味深いことに、両者が複合化しイオン伝導パスを有するマイクロネットワーク構造を形成します。ここでは、ポ



ブレンド膜の表面観察の実験で使用するデジタルマイクロスコープの前で。

リマーブラシ付と複合微粒子がマイクロ相分離構造の相溶化剤として働くと考えていますが、その機構の解明には至っていません。そこで、ポリマーブラシ付と複合微粒子の構造パラメータをナノレベルで制御し、それがポリマー／イオン液体ブレンド膜の形成に及ぼす影響を界面および高分子科学の側面から体系化することに取り組んでいます。一方で、この設計概念を各種のポリマーおよびイオン液体に適用することで本系の汎用性を実証するとともに、創出する複合膜を組み込んだエネルギーデバイスを設計・構築する応用研究にも挑戦しています。

若手研究ルポ

研究ピックアップ

放射光を利用する 溶液X線吸収分光法の 開拓

新しい鉄触媒の反応機構を
SPring-8で解明する

元素科学国際研究センター 典型元素機能化学
准教授 高谷 光

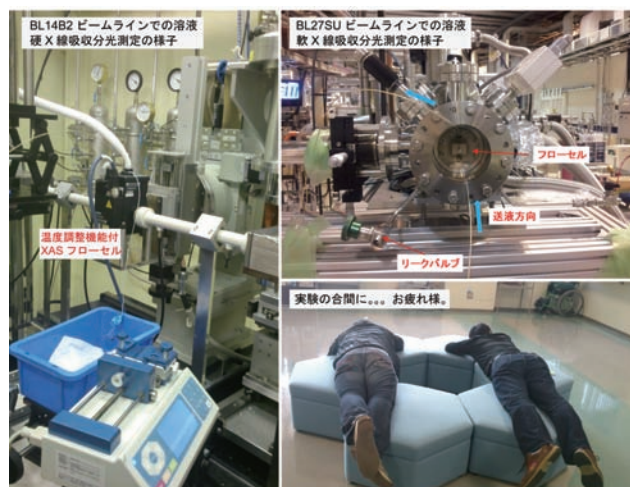
中村研究室では、環境調和性および資源性に優れた鉄を触媒とする新しい有機合成反応の開発に取り組んでいます。常磁性の有機鉄化合物や鉄錯体は、従来のNMRやESRのような分光学的手法では明瞭なスペクトルを得ることが難しく、触媒活性種の分子構造を直接正確に観察できないことが反応機構研究の妨げになっていました。そこで、我々が精力的に開発を進めているSPring-8の放射光X線分光を利用する分子構造および電子構造解析手法を、鉄触媒反



SPring-8でのハードな研究生活を共にする中村研究室のメンバーと。

応の反応機構研究に応用しました。X線分光はX線照射によって励起させた内殻電子が空の軌道に捕捉されたり、近傍原子で散乱される様子を解析することによって、分子構造を精密

に決定できるだけでなく、中心金属の電子配置や金属－配位子間の相互作用などを定量的に調べることのできる方法ですが、有機溶液のX線分光測定はまだまだ発展途上にあります。そこで、研究を始めるにあたって、まず溶液X線分光用セルの開発に取り組みました。最適なX線窓材やセル形状、送液システム等について一からの開発でしたので当初はスペクトルを得ることも難しく、はじめた当初は失敗続きでした。5年程かかりましたが、最近ようやく触媒中間体を含めて様々な鉄錯体の有機溶液試料の明瞭なスペクトルが得られるようになり、



ノーベル賞反応であるクロスカップリング反応の触媒として中村研で開発された鉄錯体触媒の反応中間体の分子構造やd電子構造を詳しく知ることができるようになっています。最近では、鉄以外にも、パラジウムや白金等の希少金属の代替触媒として期待されているニッケルやコバルト触媒等の分析にも着手しています。SPring-8での測定は昼夜を徹して行われるので、体力的にも精神的にも厳しいものがありますが、中村研メンバー一同でクラブの合宿の様な雰囲気、一致協力し、若さと気合で取り組んでいます。

新任教員紹介

元素科学国際研究センター

無機先端機能化学

准教授 菅 大介

平成26年 12月 1日 採用

略歴

京都大学 大学院理学研究科 博士後期課程 2006年修了
京都大学 化学研究所 研究員 2006～2007年
日本学術振興会 海外特別研究員 2007～2009年
メリーランド大学 博士研究員 2009～2010年
京都大学 化学研究所 助教 2010～2014年

新機能を持つ遷移金属酸化物の開発を目指して研究を行っています。最近、遷移金属元素に対して酸素原子が作り出す配位環境に着目しています。異なる酸化物から構成される人工構造やヘテロ界面を利用して、これまでにない配位環境を安定化させることで新機能の発現を目指します。今後は、新しい材料や試料作製技術を取り入れて、より広い視点をもって材料開発および機能探求に取り組んでいく所存です。また化研らしい、分野をまたいだ研究にも積極的にチャレンジしたいと考えています。どうぞよろしくお願い致します。

My Favorite

最近、囲碁を始めました。油断すると(しなくても?)
娘(6歳)に負けることがあります。



材料機能化学研究系

高分子制御合成

助教 茅原 栄一

平成26年 6月 1日 採用

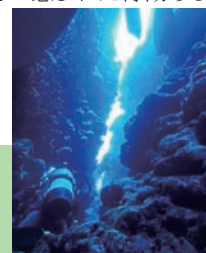
略歴

京都大学 大学院工学研究科 博士後期課程 2011年修了
京都大学 化学研究所 特定助教 2011～2014年

ベンゼン環を環状につなげたシクロパラフェニレンのような曲面状 π 共役系化合物は、有機エレクトロニクス分野等での応用の可能性が広がっています。現在、ものづくりに主眼をおき、新しいトポロジー、機能、物性などを持った新しい π 共役系化合物を創製すべく研究を行っています。化研での生活も9年目になりますが、その恵まれた特徴ある環境の下、化研の発展に貢献できるような研究、教育を進めていきたいと思っています。ご指導ご鞭撻のほどよろしくお願い致します。

My Favorite

趣味のダイビング！
ライセンスも順調にステップアップしています。



物質創成化学研究系

精密有機合成化学

特定助教 上田 善弘

平成26年11月1日 採用

略歴

京都大学 大学院薬学研究科 博士後期課程 2013年修了
東京大学 大学院工学系研究科 特任研究員 2013～2014年

学生時代を過ごした化研に戻って参りました。学生時代は川端研究室独自に開発した有機分子触媒を用い、糖類の位置選択的反応開発(多数存在する水酸基の一つだけを反応させる)と生理活性物質の全合成研究を行いました。その後博士研究員時代は特徴的なジオメトリを有する超分子錯体の構築に携わりました。今後はこれまで培った経験を活かし、超分子化学の観点を取り入れた高機能触媒による選択的官能基変換(物質変換)にトライしたいと考えています。今後ともどうぞよろしくお願い致します。

My Favorite

数年前に山登りを始めました。
年に一度は2000m超の山に登りたいと思っています。



材料機能化学研究系

高分子制御合成

特定助教 橋本 士雄磨

平成26年 8月 1日 採用

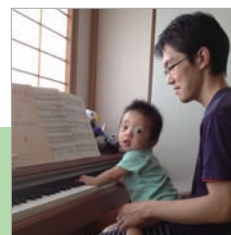
略歴

京都大学 大学院工学研究科 博士後期課程 2013年修了
米国Boston College 博士研究員 2013～2014年
京都大学 化学研究所 特定研究員 2014年

私は、学部四回生での研究室配属後から学位取得までを化研の中村研で過ごしました。そして、村田研・若宮准教授の御紹介により米国で一年修業した後、今春からは山子研でお世話になっています。いずれの研究室においても芳香族化合物の合成研究を一貫して続けており、ながら“Life of π ”とでも言うべき研究生活を送っていますが、将来的には私の名でもある「 σ (シグマ)」に繋がられないものと日々思案中です。お世話になった化研に少しでも恩返しできるよう尽力いたしますので、今後ともよろしくお願い申し上げます。

My Favorite

休日には専ら1歳の息子の子守をしています。
親子協演目指して猛特訓中です。



客員教員紹介

物質創成化学研究系

精密有機合成化学

准教授 VALERIE, Alezra

平成26年11月10日～平成27年2月9日

勤務先

University Paris Sud, ICMMO
(Institute for Molecular Chemistry and Materials of Orsay)



I am interested in asymmetric synthesis of unnatural amino acids and on conformational studies. I am thus developing original asymmetric accesses to quaternary α -amino acids (based on Memory of Chirality) or tertiary α -amino acids (absolute asymmetric synthesis based on Frozen Chirality). I am also interested in the asymmetric synthesis of β , γ -diamino acids and their use for building new foldamers.

My Favorite

Biking at Ile de Ré
(Atlantic French Island)



News 京都大学化学研究所「碧水会」(同窓会) 定期役員会・涼飲会・所内案内ビデオ上映&所内ミニツアーを開催



平成26年度定期役員会



佐藤直樹会長挨拶にて開会



寺西利治幹事長より報告

平成26年7月18日、京都大学化学研究所「碧水会」(同窓会)の平成26年度定期役員会が開催されました。平成26年度の役員選出に続いて、平成25年度事業・決算報告が行われ、平成26年度の事業計画・予算案が説明され、いずれも滞りなく承認されました。また、会員数の現状報告と化学研究所広報誌『黄檗』の「碧水会会員のひろば」およびウェブサイトについての説明があり「碧水会会員のひろば」への同窓生からの積極的な寄稿が呼びかけられました。

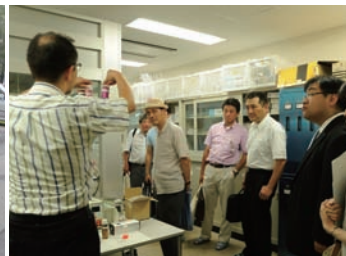
定期役員会終了後は、役員のほか希望者を対象として、「所内案内ビデオ上映&所内ミニツアー」を青山副所長の案内により行いました。その後、宇治生協会館に会場を移して、「碧水会」主催の涼飲会(親睦会)が催されました。当日は爽やかな天候に恵まれて、在学生・在籍教職員も併せた300名以上の碧水会会員が参加し、大いに親睦を深める機会となりました。



所内案内ビデオ上映



所内ミニツアー



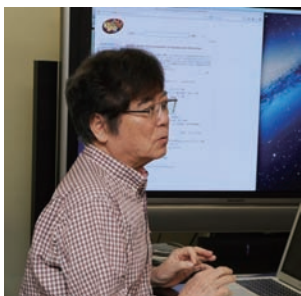
研究室見学



碧水会涼飲会(親睦会)

News KEGG お薬手帳

特任教授 金久 實



KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) とは、1995年より化学研究所で開発・提供を行ってきたデータベースで、ゲノムのシーケンスデータをはじめとした生命科学の大量データを解釈し有効利用するための標準リソースとして国際的に広く利用されています。現在はゲノム分野の研究成果を社会に還元することにも力を入れており、その1つが

KEGGお薬手帳です。KEGGの中で疾患・医薬品に関する部分をKEGG MEDICUSと呼んでおり、日本医薬情報センター(JAPIC)から毎月提供される我が国のすべての医薬品添付文書の情報が、ゲノムやパスウェイといった科学的知識と統合されています。KEGGお薬手帳はウェブブラウザのツール(<http://www.kegg.jp/okusuritecho>)で、自分が使用している処方薬や一般薬を登録すると、併用禁忌・併用注意といった飲み合わせのチェックや、妊娠中その他で禁忌の医薬品チェックが自動的になされます。また個々の医薬品添付文書のページにアクセスすると、同一薬効の先発品・後発品、それぞれの添加物の違いなどが分かるようになっています。KEGGのページにアクセスして作用・副作用メカニズムの科学的背景を調べることもできます。このリソースがさらに広く活用されるように、iPhoneで医薬品リストをミュージックのプレイリストと同じような感覚で管理できるアプリも開発中です。

KEGG お薬手帳			
利用法	Sample Data	PDF	設定
基本情報	お薬一覧	検査値	ガイド
+ リストを追加	使用中の薬のみ表示	相互作用をチェック	マークの説明
2014/11/28 皮膚科			
使用中	イトリゾールカプセル50 (錠)	1日 1回 夕食後 / 1回 2錠	横口抗真菌剤
使用中	アスチン軟膏1%	1日 2回 朝夕 足指部	抗真菌剤
2014/11/21 薬用			
使用中	ガスター10	1日 2回まで / 1回 1錠	ヒスタミンH2受容体拮抗剤含有薬
2014/11/14 内科			
使用中	クレステール錠5mg	1日 1回 夕食後 / 1回 1錠	HMG-CoA還元酵素阻害剤
使用中	カルグロックス錠16mg (錠)	1日 1回 夕食後 / 1回 1錠	持続性Ca拮抗剤



碧水会の所内ミニツアーで、KEGGお薬手帳について解説。身近な話題であるため質問も多く、終始なごやかなムードでした。

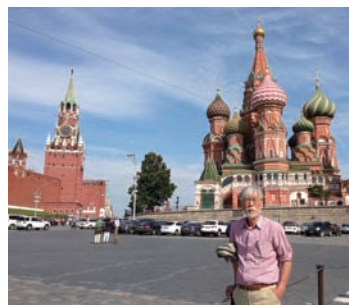
モスクワの今と昔

なか はら まさる
京都大学 名誉教授 中原 勝
(元 環境物質化学研究系 分子環境解析化学 教授)

黄檗を離れて2年余の2014年6月にモスクワを再訪した。連邦制から脱却した新ロシアで、日本学術振興会の委員会に関係するIAPWS(Int. Assoc. Prop. Water & Steam)の国際会議に日本代表として出席した。ペレストロイカ前、最中、それに今回のモスクワ。クレムリン、赤の広場に兵士の姿はなく、風景は明るく開放的であった。

東京への直行便がある日本は他国より近いとの言葉で歓迎してくれた。村上春樹について聞くと、よく読まれている。文学空間の距離感も遠くなく、感性に親近感があるらしい。出迎への研究者達にトルストイを愛読した日々の自分を重ね合わせた。プーチン大統領と友好的会談を実現した安倍首相から桜の

プレゼントがあったことを市民は喜んでた。ワシントンの桜もそうであったのだろう。会議の冒頭に立った主催者は、困ったことがあれば何でも聞いてくださいと公式発言をした後、ウクライナ問題には答えられませんが…と



ジョークを添えた。ウクライナ民族の食・ダンス・歌が日本のものに近くて今もなつかしい。もちろん研究に国境はない。

写真左側がクレムリン、中央が赤の広場入口、右側が聖ワシーリー聖堂。
撮影は、IAPWS Helmholtz Awardを受賞した吉田 健 徳島大学講師。

化研を卒業して

はいし とも ゆき
株式会社 大同 代表取締役 拝師 知行
(元 化学研究所 粉体化学研究部門)

化研に入ったのは37年前！すでに還暦を終え、1歳の孫もいます。修士修了後は花王株式会社にて化研出身の上司の下で11年過ごした後京都に戻り、父親の経営する消防防災業の株式会社大同で、今は経営者として頑張っています。

所属した植田研は、超高压TEMで「原子が見えた」と世間から注目を浴びた時でした。研究以外にも、涼飲会やバトミントンに卓球、テニスと、それぞれにエキスパートが居られ、研究以上に厚い指導を受けました。特にソフトボールは教授の名前が「夏」という事もあり、「クレイジーナッツ」と言うチーム名も。また研究室は違えども同期の4人は化研を出てからも交流は続いて

います。修士論文を書き上げるのに、1週間徹夜の缶詰め状態が続きましたが、研究室の皆様には大変お世話になりました。昨年倉田研の忘年会では、その折に特にお世話になった先輩の息子さんが！親子2代お目にかかるのは年を取ったお蔭様。



磯田先生、倉田先生には今も御付き合いいたいです。いつまでも続くアットホームな化研のDNAに感謝すると共に今後ともよろしくお願いします。

研究室はひとつの家族

た なか ゆ み
田中 裕美
(元 環境物質化学研究系 分子微生物科学)

2014年6月末までの13年3ヶ月、江崎研究室、栗原研究室で秘書としてお世話になりました。

「研究室のお母さんになって」。働き始めてしばらくすると、当時教授であった江崎先生にそう言われました。

研究室内で一番年下の私がお母さんになれるのだろうか不安でしたが、元来持っていた大阪のおばちゃん根性で、学生さんの様子に変化はないかと目を配るようにしました。すると、自然と学生さんも相談を持ちかけてくれるようになりました。研究者ではない私であるからこそ、話せることがあったのかなと思います。

研究室のお母さんになれたかどうか分かりませんが、私は研究

室がとても好きでした。化研の皆さんもいつも温かく接してくださり、雰囲気の良い職場で働くことができて幸せだったと思います。

退職はしましたが、広報誌「黄檗」も同窓会(碧水会)もあります。何よりこんなに気軽に訪れることができ、快く迎えてくれる職場はありません。これからも顔を出すことがあると思いますので、どうぞよろしくお願いいたします。



送別会での記念写真



掲 示 板

受 賞 者



竹内 勝彦 助教

井上研究奨励賞

平成26年2月4日

「ケイ素-ケイ素三重結合化合物ジシリンと含酸素、窒素、ホウ素有機小分子との反応性」

理学、医学、薬学、工学、農学等の分野で過去3年の間に博士の学位を取得した37歳未満の研究者で、優れた博士論文を提出した若手研究者に対し贈られる賞



井上 峻介 助教

日本物理学会 若手奨励賞 ビーム物理領域

平成26年3月29日

「Femtosecond Electron Deflectometry for Measuring Ultrafast Transient Field Induced by Intense Laser Pulses」

日本物理学会が将来の物理学を担う優秀な若手研究者の研究を奨励し、学会をより活性化するために設けた賞



PLASMA2014 若手優秀発表賞

平成26年11月21日

「フェムト秒レーザープラズマを背面にもつ薄膜ターゲットを用いたレーザー加速電子ビームの特性」

Plasma Conference 2014において、学術分野の発展に貢献する優秀な一般講演論文を発表（口頭発表またはポスター発表）した若手・学生会員に対して、贈られる賞



佐藤 良太 助教

日本化学会第94春季年会 優秀講演賞(学術)

平成26年4月10日

「非晶質ナノ化パラジウムナノ粒子を媒体とした高単分散パラジウム合金ナノ粒子の新規合成法の開拓」

発表内容、プレゼンテーション、質疑応答などにおいて優れた講演で、講演者の今後の一層の研究活動発展の可能性を有すると期待されるものに贈られる賞



ナノ学会第12回大会 若手優秀ポスター発表賞

平成26年5月23日

「 $\text{L}_{10}\text{-FePd}/\alpha\text{-Fe}$ ナノコンポジット磁石の精密ナノ界面制御と高性能化」

35歳以下の発表者の行うポスター発表を対象に、発表内容、プレゼンテーション、質疑応答などにおいて優れた発表で、発表者の今後の一層の研究活動発展の可能性を有すると期待されるものに贈られる賞



栗原 達夫 教授

長瀬研究振興賞

平成26年4月25日

「膜タンパク質の高次構造形成と翻訳後修飾における高度不飽和脂肪酸の機能解析」

生化学及び有機化学等の分野における研究開発に対し助成等を行うことにより、科学技術の振興を図り、社会経済の発展に寄与することを目的として贈られる賞



齊藤 高志 助教・島川 祐一 教授

粉体粉末冶金協会 研究進歩賞

平成26年6月3日

「高圧合成を中心とした新規機能性酸化物材料の合成」

粉体・粉末冶金に関する基礎研究で、独創的アイデアをもち、理論的評価の高い優秀な研究と認められたものに対し、その功績を賞して贈られる賞



金久 實 特任教授

2014 Thomson Reuters Highly Cited Researchers

平成26年6月18日

トムソン・ロイター社が世界中で引用された回数の多い論文の著者を選出し、その対象者に贈られる賞



五斗 進 准教授

2014 Thomson Reuters Highly Cited Researchers

平成26年6月18日

トムソン・ロイター社が世界中で引用された回数の多い論文の著者を選出し、その対象者に贈られる賞



バイオ情報学研究会 功労賞

平成26年12月18日

「Contribution to development of SIGBIO as a chair of SIGBIO」

バイオ情報学研究会主査として研究会の発展に多大な尽力をしたことにより贈られる賞



受賞者



梶 弘典 教授

有機EL討論会 第7回業績賞

平成26年7月18日

「量子化学計算を用いた有機エレクトロニクス材料の理論的研究」

有機ELおよび関連する科学技術における顕著な業績をあげたものに対して贈られる賞



二木 史朗 教授

平成25年度特別研究員等審査会専門委員表彰（書面担当）

平成26年7月31日

日本学術振興会が学術研究の将来を担う研究者の養成・確保を目的として行っている特別研究員等の書面審査において、有意義な審査意見を付した専門委員に贈られる賞



吉田 弘幸 助教

Grand Renewable Energy 2014 International Conference Best Oral Presentation Award

平成26年8月1日

「Low Energy Inverse Photoemission Study of the LUMO Levels of Acceptors for Organic Photovoltaic Cells」

再生可能エネルギー2014国際会議において優秀な口頭発表をしたものに贈られる賞



応用物理学会 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会論文賞

平成26年9月18日

「Near-Ultraviolet Inverse Photoemission Spectroscopy Using Ultra-Low Energy Electrons」

有機分子エレクトロニクスおよびバイオエレクトロニクス分野の進歩向上に寄与する優秀な原著論文の著者に対して贈られる賞



岩下 芳久 准教授

日本加速器学会 技術貢献賞

平成26年8月10日

「超伝導加速空洞・表面仕上げシステムの開発」

加速器の建設、運転、利用の高度化、製造技術の開発等に対する寄与が顕著と認められる技術的貢献に対して贈られる賞



小野 輝男 教授

第13回ドコモ・モバイル・サイエンス賞 基礎科学部門 優秀賞

平成26年10月17日

「ナノ磁性体を用いた新規スピンドバイスの基礎と応用展開」

日本国内における移動通信の発展と若手研究者の育成を目的とし、移動通信・情報通信分野で優れた研究成果・論文等の業績をあげた研究者に対して贈られる賞



InTech Award Diploma

平成26年10月26日

「Efficient Algorithms for Finding Maximum and Maximal Cliques: Effective Tools for Bioinformatics」

際立って多数のダウンロードがなされた解説記事に対して出版社より贈られる賞



阿久津 達也 教授

バイオ情報学研究会 功労賞

平成26年12月18日

「Contribution to establishment of IPSJ Transactions on Bioinformatics and development of SIGBIO as a chair of SIGBIO」

バイオ情報学研究会主査として研究会の発展に多大な尽力をしたことにより贈られる賞



烏山 昌幸 助教・馬見塚 拓 教授

DREAMチャレンジ 遺伝子エッセンシャルティ予測 第1位

平成26年11月11日

「Best Performer in the DREAM 9 Broad-DREAM Gene Essentiality Prediction Challenge Sub-Challenge 1」

生命科学の重要な問題を参加者が競って解決するコンペティションであるDREAMチャレンジの遺伝子エッセンシャルティ予測サブチャレンジ1において予測精度第1位を達成したチームに贈られる賞



古田 巧 准教授

第12回有機合成化学協会 関西支部賞

平成26年12月2日

「ビリアル型アミノ酸を起点とする分子認識型触媒の開発」

新規性または独自性が認められる萌芽的な研究、産・学界の研究・技術で独自性が窺えるもの、社会的価値があるものに与えられる賞



第19回 京大化研奨励賞 京大化研学生研究賞

本賞は、優秀な研究業績をあげた化研の若手研究者と大学院生を表彰するものです。平成24年度より、外国人若手研究者・大学院生の研究の一層の奨励を目的に、外国人研究者枠が設けられています。



京大化研奨励賞 ICR Award for Young Scientists

材料機能化学研究系 高分子制御合成 助教

茅原 栄一

Synthesis and Physical Properties of a Ball-like Three-dimensional π -Conjugated Molecule

フラーレンやカーボンナノチューブに代表される閉じた三次元構造を持つ π 共役系化合物は次世代材料の中核を成す物質群です。そのため、これまでに存在しない新しい構造、物性、機能を持った三次元炭素ナノ分子の創製研究の重要性は益々高くなっていますが、従来の方法では、得られる分子の構造が大きく限定されていました。本研究では、独自の合成手法を用いることで、従来法では達成困難な新しい三次元炭素ナノ分子の合成に成功しました。本論文の成果をさらに発展させることで、様々な新規三次元炭素ナノ分子の合成が可能になると期待されます。最後に本研究の共同研究者、山子茂教授、高谷光准教授、安田伸広博士(高輝度光科学研究センター)、鈴木敏泰准教授(分子科学研究所)、真嶋哲郎教授、藤塚守准教授(大阪大学産業科学研究所)に深く感謝いたします。



元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学 研究員

TEX, David

(外国人研究者枠)

Control of Hot-carrier Relaxation for Realizing Ideal Quantum-dot Intermediate-band Solar Cells

Solar cells can provide electrical energy with low environmental impact. High power conversion efficiencies are important to lower costs and widen scope of application. Novel solar cells, such as intermediate band solar cells, have been considered for this purpose. However, the intermediate band solar cells are still in an experimental stage. They contain special structures, such as quantum structures, designed to absorb additional infrared photons. Our recent work reveals that the efficient extraction of these photons as current is rather difficult due to strong re-capture processes. We demonstrated that the control of this re-capture process is an important key for realizing intermediate band solar cells. I am happy to receive the ICR award for young scientists and would like to express my gratitude to my co-authors.



京大化研学生研究賞 ICR Award for Graduate Students

物質創製化学研究系 有機元素化学
博士後期課程2年

長田 浩一



Syntheses and Structures of Terminal Arylalumylene Complexes

13族元素メタリレン(RE:)は、13族元素上に孤立電子対と2つの空のp軌道を有するため、COと同様に σ 供与/ π 酸性配位子として働き遷移金属との多重結合の形成が予想されるが、アルミレン錯体に関しては合成・単離例はなく、構造は未知であった。本研究では、筆者が以前に報告したジアルメン-ベンゼン付加体をアルミレン等価体として用いることで、初めての二配位アルミレン錯体の合成に成功した。本錯体では、アルミニウムと遷移金属間に多重結合の存在が示唆された。本研究は、時任宣博教授、吾郷友宏助教のご指導のもと行われたものであり、ここに深く感謝いたします。

物質創製化学研究系 構造有機化学
博士後期課程2年

西村 秀隆



On-Top π -Stacking of Quasiplanar Molecules in Hole-Transporting Materials: Inducing Anisotropic Carrier Mobility in Amorphous Films

有機エレクトロニクス分野において、優れた有機半導体材料の開発は、依然、重要課題の一つとなっています。本研究では、その新しい分子設計として、トリアリールアミン骨格を酸素で部分的に架橋することで構築できる準平面型骨格を鍵骨格に用いることを考えました。このモデル化合物として合成した二量体は、結晶中で準平面型骨格が分子間ではまり込む形で一次元方向に重なった on-top 型の π スタッキング構造を形成することがわかりました。さらに、この化合物は非晶質性の膜状態でもこの配向をある程度保持しており、基板に対して垂直方向に高い電荷輸送特性を発現することを見出しました。本研究は、村田靖次郎教授、若宮淳志准教授の指導のもと、多くの先生方との共同研究として行われたものであります。梶弘典教授、福島達也助教(分子材料化学研究領域)、笹森貴裕准教授(有機元素化学研究領域)、関修平教授、佐伯昭紀准教授(大阪大学)、尾坂格博士(理化学研究所)に感謝いたします。

バイオフィーマティクスセンター
生命知識工学 博士後期課程3年

MOHAMED, Ahmed
Mohmed (外国人研究者枠)



NetPathMiner: R/Bioconductor Package for Network Path Mining through Gene Expression

Investigation of genome-scale networks enhances our understanding of biological systems; particularly the relationship of active subnetworks and different experimental conditions. However, manual investigation of genome-scale networks is challenging because of their size and complexity. We present NetPathMiner; a software package in R that takes a genomes-scale network and gene expression data, and returns a ranked list of linear paths that are related to specific experimental conditions. For easier interpretation, NetPathMiner applies machine learning methods to ranked paths and provides static and interactive visualizations.

It is an honor for me to receive this prestigious award. I am sincerely grateful for Prof. Hiroshi Mamitsuka, Drs. Timothy Hancock and Canh Hao Nguyen for their guidance and supervision in this study.

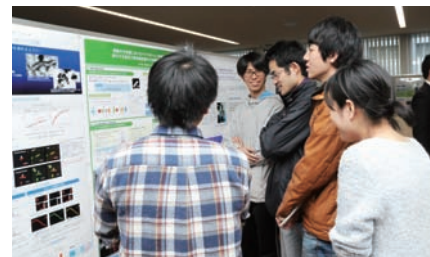
第114回化学研究所研究発表会を開催

平成26年12月12日

京都大学 宇治おうばくプラザ

第114回化学研究所研究発表会が平成26年12月12日(金)、宇治おうばくプラザきほだホールにて開催された。青山卓史副所長の開会挨拶の後、4件の口頭発表、京大化研奨励賞(2件)と京大化研学生研究賞(3件)の授与式および受賞講演、「化研らしい融合的・開拓的研究」に採用された6件の研究課題の成果報告が行われた。また、宇治おうばくプラザハイブリッドスペースにてポスター発表(69件)があった。講演会では活発な質疑応答が行われ、充実した発表会となった。プログラムは下記URL参照。

http://www.kuicr.kyoto-u.ac.jp/event/rp2014_114.html



研究所の機能強化策の教職協働による集中的検討のためのFD 「化研の明日を語るFD」

平成26年12月5日～6日

ラフォーレ琵琶湖

平成26年12月5日～6日に一泊二日の日程で滋賀県守山市のラフォーレ琵琶湖にて「化研の明日を語るFD(Faculty Development)」が執り行われました。これは、本年度の全学経費事業として採択されている事業であり、化学研究所教員47名、生存圏研究所およびエネルギー理工学研究所教員各2名、事務系職員22名、技術系職員2名、URA職員3名の計78名が参加しました。16の演題を含む4つのセッションでは、事務系およびURA職員側から研究・教育サポート体制の現状が紹介されるとともに、教員側からは自らの研究・教育の魅力や夢が判り易い言葉で伝えられました。また、他研究所教員からは化学研究所との連携の紹介などの話題が提供されました。さらに初日夕食後のフリーディスカッションでは、教職員間で日頃感じられている問題点やその改善策について、忌憚のない討論が深夜まで活発に行われました。このFD事業により全教職員を通じた一体感が形成され、化学研究所の研究・教育におけるさらなる機能強化が図られるものと期待されます。

(副所長:青山 卓史)



平成26年度化学研究所 イブニングセミナー

平成26年10月8日・11月12日

化学研究所 共同研究棟 大セミナー室

イブニングセミナーは、所内のさまざまな分野の教員から専門特化しすぎない話題をご提供いただき、参加者が自由な雰囲気の中で議論できるインフォーマルな場を提供するものです。10月8日の第1回では生体触媒化学の平竹潤教授に「 γ -グルタミルトランスペプチダーゼ阻害剤の分子設計とその活性」の演題で、11月12日の第2回では化学生命科学の緒方博之教授に「ウイルスは生命か? ―巨大ウイルスを中心に―」の演題でそれぞれ講演いただきました。

(平成26年度講演委員長: 村田 靖次郎)



▲平竹 潤 教授



▲緒方 博之 教授

化研若手の会

平成26年11月14日に、第22回化研若手の会が開催されました。今回は井原先生と竹内先生にご講演を依頼し、化学研究所に在籍する学生、教職員を含めた約35名の若手研究者を交えて、終始質問の絶えない分野の枠を越えた活発な議論が行われました。また、京都大学が所有する知的財産権の技術移転業務を委託されている関西TLO株式会社の藤田様にお越しいただき、大学における特許運用の在り方について考える機会を設けました。

(第22回世話役: 佐藤 良太)

平成26年11月14日(金) 化学研究所本館N棟 5階会議室(N-531C)

井原 章之 助教

(元素科学国際研究センター 光ナノ量子元素科学研究領域)

「単一半導体ナノ粒子の発光明滅とスペクトル拡散」

藤田 直子氏(関西TLO株式会社)

「京都大学における知的財産権の確保と活用についての取り組み」

竹内 勝彦 助教

(元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学研究領域)

「ケイ素-ケイ素三重結合、FLP、そしてホスファールケン錯体」

掲 示 板

第2回京都大学ー国立台湾大学合同シンポジウム 「ナノサイエンス&テクノロジー」セッションを開催

平成26年9月1日～2日

宇治おうばくプラザ セミナー室

第2回京都大学（KU）ー国立台湾大学（NTU）合同シンポジウムが平成26年9月1日～2日、両大学の国際共同研究を活性化するため、京都大学にて開催された。初日午前中には、本部キャンパス百周年時計台記念館で両大学の各分野からそれぞれ100名を超える教職員の参加を得て開会式が催され、両大学間での研究者交流やデュアルディグリー制度の推進を図る大学間交流協定の調印が執り行われた。開会式の後、「ナノサイエンス&テクノロジー」セッションが、宇治おうばくプラザに会場を変えて開催された。

このセッションは、Li-Chyong Chen（林麗瓊）教授（NTU）と筆者を世話人として企画され、NTUからは同大化学科および研究科、材料科学與工程学科、物理学研究科、および凝縮物質化学センターの4部局から11名、京大化研から7名の研究者にそれぞれの最新の研究成果を講演していただき、両大学の化学・材料科学系の研究者間での密な意見交換を行い、基礎化学から応用材料科学に至るまで幅広い分野で今後の相互交流の強化を図るべく、充実した二日間のシンポジウムを楽しんだ。

化学研究所は、NTUの化学・材料科学系の各部局と古くから交流を深めてきたが、さらに一昨年末に台北で開催された第1

回KUーNTU合同シンポジウムでの化研訪問団の交流実績を踏まえて、2014

年にNTUの関連各部局と化研の間で部局間学術交流協定（国立台湾大化学専攻：3月18日、凝縮物質化学研究センター：4月4日、同大材料科学與工程学科：5月30日）を締結している。

今後は、これまでの交流実績とこれらの学術交流協定に基づいて、両大学の化学系各部局間での積極的な研究者および学生の交流を図り、新規な共同研究展開や新たな研究分野の開拓につながるように益々親交を深めたいと考えている。

（物質創製化学研究系 有機元素化学 教授：時任 宣博）



「東京で学ぶ京大の知」シリーズ16第2回を開催

平成26年9月22日

京都大学 東京オフィス

標記のシリーズ16「社会に浸透する情報技術」の第2回目として、「ゲノム情報のコンピュータ解析ー高校数学+ α による先端的解析手法ー」というタイトルでDNA配列の解読に不可欠なコンピュータによる情報解析手法、および、解析結果の医療への応用可能性などについて講演を行った。男女含めて幅広い年齢層にわたる多くの参加者があり、オーダーメイド医療、遺伝子特許などに関する活発な質疑応答が行われた。

（バイオインフォマティクスセンター 数理生物情報 教授：阿久津 達也）



edX講義受講の成績優秀者が化学研究所を来訪

平成26年7月9日、edXの講義「The Chemistry of Life(生命の化学)」の受講者2万269人の中から優秀な成績を収めた6名が化学研究所を訪れました。6名は、アメリカ、セルビア、ラトビア、ペルー、ベトナム、フィリピンの17歳から26歳の男女で、4月から7月にかけて本講義を配信した京都大学の招きで京都に滞在中でした。化学研究所の施設を見学したのち、本講義を担当した上杉志成教授（iCeMS主任研究者兼化学研究所教授）の研究室で懇談が行われました。

edX開講から成績優秀者選考に至る一連の経緯が、「化学と工業」2014年12月号（Vol.67-12）の巻頭言（上杉教授執筆）に掲載されました。



化学研究所 若手研究者国際短期派遣事業 若手研究者国際短期受入事業

採択者リスト（平成26年1月1日～平成26年12月31日迄）

海外研究滞在一派遣

藤田 健弘（高分子制御合成 D3）	川口 祥正（生体機能設計化学 D2）
高野 祥太郎（水圏環境解析化学 D3）	永田 真己（ナノスピントロニクス D3）
吉村 瑠子（ナノスピントロニクス D2）	

研究滞在一受入

Paul Michael Cogswell（イギリス） （University of Bristol, D3）	Zhi-Chao Yan（中国） （The Chinese Academy of Science, D3）
Michael Langeloth（ドイツ） （Technische Universität Darmstadt, D2）	Alice Gros（フランス） （Ecole Centrale de Nantes GeM, D1）
Safwan Aroua（スイス） （ETH Zürich, Ph Dコース4年次）	

グローバルな最先端研究・教育と国際連携を支える研究者の育成・開拓をめざし、化学研究所に所属する若手研究者の国際短期派遣・化学研究所教員をホストとする海外若手研究者の短期受入を柔軟かつ機動的に支援しています。

第17回高校生のための化学

～先端高度研究の一端を学ぶ～

平成26年7月26日

暑い夏の日、全国から84名の高校生参加者を得て、今回で第17回となる「高校生のための化学」が盛大に実施されました。午前の部では、佐藤直樹所長(現 京都大学 理事・副学長、現 化学研究所教授兼任)による化学研究所の概要説明、高谷光准教授による宇宙の元素組成についての講演があり、参加者は熱心に耳を傾け、メモを取り、質問をしました。午後は、9つの見学・体験サイトに分かれ、先端機器を装備する研究室を見学し、創意工夫された実験・実習に取り組みました。白衣をまとった高校生は、大学院生さながらで頼もしく映りました。実験・実習のレポートを後日提出してもらい、提出者には「修了書」が、優れたレポートに対しては「最優秀賞(2名)」と「優秀賞(4名)」が贈られました。

(平成26年度 広報委員会：緒方 博之)



京都大学宇治キャンパス公開2014

平成26年10月25～26日

今年で18回目を迎えた宇治キャンパス公開が、「気になる科学がきっとある!」という統一テーマで開催されました。化学研究所は、3名の教授による公開講演会や8研究室による公開ラボなどを通して本行事に参加しました。当日は好天にも恵まれ、宇治キャンパス会場と宇治川オープンラボラトリー会場をあわせて過去最高3,364人の参加者(昨年に比べて600人以上の増加)がありました。ケミルミネッセンス、磁石、ガラス、色素、高分子、スーパーコンピューター、電子顕微鏡、レーザーなどをテーマとした公開ラボは多くの親子連れを含む老若男女の参加者で賑わいました。

(宇治キャンパス公開2014実行委員会：栗原 達夫、川本 純)



第21回化学研究所 公開講演会

平成26年10月26日

平成26年10月26日、第21回化学研究所 公開講演会を開催しました。川端猛夫教授(物質創製化学研究系 精密有機合成化学)による講演「もの作り(化学合成)の醍醐味：相手を見分けて化学反応を起こす触媒」の講演では、右手と左手のように鏡映しの構造をもつキラル分子の性質を医薬品を例に解説しました。次の長谷川健教授(環境物質化学研究系 分子環境解析化学)の講演「フッ素化合物の不思議と界面物理化学」では、フライパンの加工等にも利用されているフッ素化合物の撥水撥油性、防汚性、耐熱性等の性質がどのようなメカニズムで発生するかを解説し、幅広い利用法を紹介しました。最後の、渡辺宏教授(複合基盤化学研究系 分子レオロジー)の



川端 猛夫 教授 長谷川 健 教授 渡辺 宏 教授



講演「弾む液体、流れる固体：レオロジーへの誘い」では、レオロジーがどのような学問であり、社会ではどのように役立てられているのかを解説し、物質が流れる様子を模型を用いて解き明かしました。来聴者より熱心に質問が投げかけられ、活発な講演会となりました。ご来場いただいた皆様、ありがとうございました。

(平成26年度 講演委員長：村田 靖次郎、広報室)

平成26年度 化学研究所 所内見学カレンダー

● 6月24日 京都府立洛北高等学校附属中学校

核磁気共鳴装置(NMR)、電子顕微鏡見学、液体窒素を使った実験の体験学習など 26名
対応者：倉田 博基 教授、宗林 由樹 教授ら

● 7月26日 第17回高校生のための化学

～先端高度研究の一端を学ぶ～
体験・見学サイト：9サイト 84名

● 7月28日～8月8日 京都府立洛北高等学校

スーパーサイエンスハイスクール
「サイエンスⅡ 夏季研究室訪問研修」 20名
対応者：辻井 敬亘 教授、青山 卓史 教授、梶 弘典 教授、島川 祐一 教授ら

● 7月31日 京都府立嵯峨野高等学校

実験講義、NMR、電子顕微鏡見学、体験学習など 28名
対応者：平竹 潤 教授、倉田 博基 教授

● 8月 1日 福岡県立明善高等学校

ケミカルバイオロジー研究領域、粒子ビーム科学研究領域、
構造分子生物科学研究領域の見学など 45名
対応者：大神田 淳子 准教授、岩下 芳久 准教授、
伊藤 嘉昭 准教授、治田 充貴 助教授ら

● 10月25日～26日 宇治キャンパス公開2014

● 10月26日 第21回化学研究所公開講演会

「もの作り(化学合成)の醍醐味：相手を見分けて
化学反応を起こす触媒」 川端 猛夫 教授
「フッ素化合物の不思議と界面物理化学」 長谷川 健 教授
「弾む液体、流れる固体：レオロジーへの誘い」 渡辺 宏 教授

● 11月11日 京都府立洛北高等学校附属中学校

核磁気共鳴装置(NMR)、電子顕微鏡見学、
液体窒素を使った実験の体験学習など 27名
対応者：倉田 博基 教授、宗林 由樹 教授ら

● 11月19日 京都府立城南養育高等学校

バイオインフォマティクスに関する講義、生体分子情報研究
領域、高分子材料設計化学研究領域、精密無機合成化学
研究領域、スーパーコンピュータシステム見学 83名
対応者：阿久津 達也 教授、青山 卓史 教授、
辻井 敬亘 教授、寺西 利治 教授ら



平成26年度 化学研究所 出張講義カレンダー

● 4月24日 京都府立洛北高等学校

サイエンスⅡ特別講義「無機機能性材料：宝石を作ろう!!」
島川 祐一 教授

● 5月1日 京都府立洛北高等学校

サイエンスⅡ特別講義「DNAの化学」
青山 卓史 教授

● 5月15日 京都府立洛北高等学校

サイエンスⅡ特別講義「高分子の魅力 新しい構造が生
み出す革新機能」
辻井 敬亘 教授

● 5月22日 京都府立洛北高等学校

サイエンスⅡ特別講義「電気を流す、光る有機分子
ー 合成、NMR測定、および有機ELデバイスの作製」
梶 弘典 教授

● 6月26日 京都府立洛北高等学校附属中学校

洛北サイエンス特別講義「実物に触れて学ぶ化学とはどの
ようなものか?」
平竹 潤 教授

● 7月24日 和歌山信愛高等学校

「福島原発事故の影響と復興への取り組み～放射線の
基礎、除染に関する諸問題～」
徳田 陽明 准教授、上田 義勝 生存圏研究所 助教

● 11月15日 東京都立戸山高等学校

「福島原発事故の影響と復興への取り組み～放射線の
基礎、除染に関する諸問題～」
徳田 陽明 准教授、上田 義勝 生存圏研究所 助教

掲 示 板

研 究 費(後期採択分)

平成26年度 科学研究費助成事業 一覧

種 目	研 究 課 題	代表者	補助金
研究活動 スタート 支援	根毛形態形成における細胞内局所的なカルシウムーリン脂質シグナル変換機構と分子基盤	助教 加藤 真理子	1,430
	カチオン- π 相互作用を鍵とした芳香族C-H活性化反応の開発	特定助教 岩本 貴寛	1,300
	小 計	2件	2,730
特別 研究員 奨励費 (外国人)	触媒的な基質識別による脂肪族アルデヒド間の直接的不斉交差アルドール反応	YELLA, Ramesh	600
	ジャロシンスキー守谷相互作用下での電流駆動磁壁移動の研究	KIM, Sanghoon	600
	小 計	2件	1,200
	合 計	4件	3,930

補助金金額は直接経費と間接経費の総額、単位:千円

平成26年度 受託研究・事業

新エネルギーベンチャー技術革新事業「フェーズC(実用化研究開発)」(NEDO)

ポリマーモノリスによる高信頼性リチウムイオン電池用 セパレータの実用化研究開発

教授 辻井 敬亘

科学技術試験研究委託事業

耐災害性に優れた安心・安全社会のためのスピントロニクス材料・デバイス基盤技術の研究開発(磁壁移動素子における電流誘起磁場の理解と応用)

教授 小野 輝男

●未来社会実現のためのICT基盤技術の研究開発

●東北大学との連携プロジェクト

ソフトマテリアルのグリーンイノベーションに向けた構造とダイナミクスの評価

教授 金谷 利治

●光・量子融合連携研究開発プログラム

●九州大学先端物質化学研究所との連携プロジェクト

戦略的創造研究推進事業(CREST)

海洋微生物ゲノムと環境データのインフォマティクス解析

准教授 五斗 進

戦略的創造研究推進事業 先端的低炭素化技術開発(ALCA)

精密エネルギー準位の解析

助教 吉田 弘幸

研究成果展開事業 研究成果最適展開支援プログラム(A-STEP)

有機触媒型リビングラジカル重合を基盤とした高性能高機能色彩材料の開発

准教授 後藤 淳

●シーズ育成タイプ

分子標的型新規MRI造影剤の研究開発

准教授 大野 工司

●ハイスク挑戦タイプ

共同研究 (平成26年6月～12月契約分)

新規な典型元素クラスター化合物の合成とその構造・物性の解明

教授 時任 宣博

●独立行政法人理化学研究所

平成25年度産業技術研究開発(革新的触媒による化学製品製造プロセス技術開発プロジェクトのうち二酸化炭素原料化基幹化学製品製造プロセス技術開発):ソーラー水素等製造プロセス技術開発(革新的光触媒)

教授 寺西 利治

●人工光合成化学プロセス技術研究組合

リビングラジカル重合に関する共同研究

教授 山子 茂

●大塚化学株式会社

高分子材料の構造解析

教授 梶 弘典

●民間企業

有機光電変換材料を用いた近赤外撮像素子の研究

教授 梶 弘典

●パナソニック株式会社

計算化学を活用した有機分子設計に関する研究

教授 梶 弘典

●日本化薬株式会社

高分子材料の構造解析

教授 長谷川 健

●積水化学工業株式会社

他6件

京都大学産学共同実用化促進事業 事業化推進型共同研究

アンチエイジング化粧品成分ナールスゲンの機能開発と医薬部外品へのランクアップ

教授 平竹 潤

●株式会社ナールスコラボレーションとの共同研究

奨学寄附金 (平成26年6月～12月採択分 財団等よりの競争的研究資金)

基質認識型アニリン触媒による脂肪族アルデヒド間の直接的不斉交差アルドール反応

准教授 古田 巧

●公益社団法人 内藤記念科学振興財団

酸化物ガラス蛍光体の発光中心の局所構造制御研究助成

助教 正井 博和

●公益財団法人 京都技術科学センター

レーザー生成プラズマを用いた新たなレーザー加速パルス電子の高強度化技術に関する研究

助教 井上 峻介

●公益財団法人 松尾学術振興財団

(100万円以上)

異動者一覧

平成26年6月1日 採 用

助教 茅原 栄一(材料機能化学研究系) 化学研究所 特定助教から

平成26年8月1日 採 用

特定助教 橋本 士雄磨(材料機能化学研究系) 化学研究所 特定研究員から

平成26年9月30日 辞 職

教授 佐藤 直樹(複合基盤化学研究系) 京都大学 理事に

特定助教 石毛 亮平(材料機能化学研究系) 東京工業大学 助教に

平成26年10月1日 兼 任

教授 佐藤 直樹(複合基盤化学研究系 分子集合解析研究領域)

平成26年11月1日 採 用

特定助教 上田 善弘(物質創製化学研究系) 東京大学 特任研究員から

平成26年12月1日 昇 任

准教授 菅 大介(元素科学国際研究センター) 化学研究所 助教から

海外研究レポート

場所: スイス チューリッヒ工科大学
期間: 2014年4月1日～6月29日

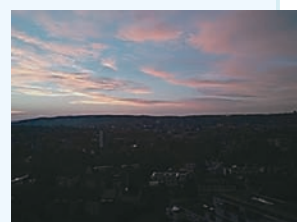
環境物質化学研究系 水圏環境解析化学 博士後期課程3年 高野 祥太郎

化学研究所若手研究者国際短期派遣事業により、4月1日から6月28日まで、チューリッヒ工科大学のDerek Vance教授の研究室に滞在し、研究を行いました。チューリッヒは、歴史ある建物、美しい自然、便利な交通網のあるすばらしい都市です。ただ、非常に物価が高いことには、苦労しました。

今回の滞在の目的の一つは、海水中銅同位体比分析法の相互校正でした。海洋の微量元素とその同位体比は、海洋における強力なトレーサー・プロキシになることから、世界中で活発に研究が行われて

います。銅同位体比については、現在までに我々を含めて3つのグループによって発表されていますが、それぞれの分析法の相互校正が未だ成されていないため、異なる分析法によって得られた値を比較し、議論することができませんでした。そこで、我々が現在までに開発した分析法と、訪問先研究室で使われている分析法を用いて、同一海水試料を分析することで、相互校正を行いました。

このような機会を与えてくださった関係者の皆様に感謝いたします。



チューリッヒの夕焼け
(下宿先の屋上から)

公開ラポレポート

10月25日～26日 宇治キャンパス公開

ケミルミネッセンス: 化学の力で有機化合物を光らせよう!

物質創製化学研究系 構造有機化学 修士課程2年 橋川 祥史

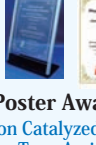
私たちの研究室では、身の回りの化学現象である「発光」に着目し、蛍光物質を実際に手にとってもらい、エネルギーを与えることで発光する様子を体験してもらっています。実験方法は至って簡単で、赤・青・緑の三種類の色素溶液を用意し、ここにブラックライトを照射したり(光エネルギーによる発光)、酸化剤溶液を加える(化学エネルギーによる発光)というものです。なかでも、複数の色素溶液を混ぜ合わせて好みの発光色を調製するコーナーが人気で、色素溶

液が強く光る様子に子供たちは歓喜の声を上げていました。今年度ラポ運営に新たに加わった学生4名(修士課程1年生と学部4年生)は、最初は戸惑っていましたが、徐々に馴染んでいき、存分に楽しむことができました。公開キャンパスは大盛況のうちに終わり、当ラポの来場者数は2日間でのべ700人に達しました。まだまだ課題は残りますが、次回も来場者の方々に楽しんでもらえるように、研究室一丸となって公開キャンパスに取り組みたいと思います。



キャンパス公開当日は実験と撮影を担当しました。

受賞者

 長田 浩一 平成26年7月18日 物質創製化学研究系 有機元素化学 博士後期課程2年 第26回有機金属化学国際会議(ICOMC) 学生ポスター賞 「Syntheses and Structures of Alumylene-Platinum Complexes」 	 丸山 直輝 平成26年10月16日 物質創製化学研究系 構造有機化学 修士課程1年 第6回薄膜太陽電池セミナー2014 最優秀ポスター講演賞 「高効率有機無機ハイブリッド型太陽電池のための作製法開発」 
 Chaolumen 平成26年9月9日 物質創製化学研究系 構造有機化学 博士後期課程1年 第25回基礎有機化学討論会 ポスター賞 「Synthesis and Properties of Dibenzo[a,f]perylene Bisimide Derivatives」 	 馬場 智明 平成26年9月12日 物質創製化学研究系 精密有機合成化学 博士後期課程3年 第44回複素環化学討論会 Chemical and Pharmaceutical Bulletin Poster Award 「Intramolecular Asymmetric Cross-Aldol Reaction Catalyzed by Axially Chiral Acid-Base Catalysts Bearing Aniline Type Amine」 
 張 鋭 物質創製化学研究系 構造有機化学 博士後期課程1年 第25回基礎有機化学討論会 ポスター賞 平成26年9月9日 「C₆₀S骨格をもつ開口チアフラレンの合成とX線構造」 	 竹内 裕紀 平成26年8月10日 物質創製化学研究系 精密有機合成化学 博士後期課程2年 第16回日本糖質学会 ポスター賞 「グルコースの位置選択的修飾による配糖体合成」 
 第4回CSJ化学フェスタ2014 優秀ポスター発表賞 平成26年11月10日 「開口チアフラレンC₆₀S誘導体の合成とX線構造」 	 藤森 悠介 平成26年9月6日 物質創製化学研究系 精密有機合成化学 修士課程1年 第27回国際ポリフェノール会議2014 ポスター賞 「Total Synthesis of Ellagitannins via Regioselective Acylation of Glucose」 
 橋川 祥史 平成26年11月10日 物質創製化学研究系 構造有機化学 修士課程2年 第4回CSJ化学フェスタ2014 優秀ポスター発表賞 「水素分子内包アザフラレンの合成」 	 呉 欣倫 平成26年5月23日 物質創製化学研究系 精密有機合成化学 研究員 ナノ学会第12回大会 若手優秀ポスター発表賞 「Shape Dependent Crystal Structural Control of Semiconductor Nanocages」 

掲 示 板

 木村 仁士 平成26年9月4日 物質創製化学研究系 精密無機合成化学 修士課程1年 第65回コロイドおよび界面化学討論会 ポスター賞 「Au/ZnSヘテロ構造ナノ粒子の合成と光学特性」 	 宮坂 泰弘 先端ビームナノ科学センター レーザー物質科学 研究員 The 9th Asia Pacific Laser Symposium Young Researcher Presentation Award 平成26年4月24日 「Ablation Rate Dependence on Incident Angle and Polarization for Copper Irradiated by Femtosecond Laser Pulses」 The ICEPEA-9 Outstanding Student Paper Award 平成26年10月3日 「Dependence of Ablation Rate on Laser Fluence for Metals by Oblique Femtosecond Laser Irradiation」 
 黄瀬 雄司 平成26年7月18日 材料機能化学研究系 高分子材料設計化学 修士課程2年 第21回セルロース学会年次大会 優秀ポスター賞 「位置選択的反応を用いた両親媒性セルロース系ボルトブラシの合成」 	 関 隼人 平成26年11月10日 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学 博士後期課程2年 第4回CSJ化学フェスタ2014 優秀ポスター発表賞 「ペロブスカイト SrFe_{1-x}Ni_xO₃のイオン価数状態と磁気特性」 
 川口 祥正 平成26年10月24日 生体機能化学研究系 生体機能設計化学 博士後期課程2年 第51回ペプチド討論会 ポスター賞 「Identifying Membrane Proteins Involved in Cellular Uptake of Octaarginine Peptide by Photocrosslinking」 	 保坂 祥輝 平成26年11月10日 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学 博士後期課程1年 第4回CSJ化学フェスタ2014 優秀ポスター発表賞 「2次元に配列した異常高原子価 Fe⁴⁺を含む新奇層状ペロブスカイト」 
 村山 知 平成26年11月17日 生体機能化学研究系 生体機能設計化学 博士後期課程1年 サントリー生命科学財団 生物有機科学研究所シンポジウム2014 ベストディスカッション賞 	 村上 永晃 平成26年9月17日 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学 修士課程2年(平成26年3月24日修了) 第36回応用物理学会 講演奨励賞 「LaAlO₃/CaFeO_{2.5}/SrTiO₃ヘテロ構造中の酸化還元過程における酸素イオン拡散」 
 秋柴 美沙穂 生体機能化学研究系 生体機能設計化学 修士課程1年 第51回ペプチド討論会 若手口頭発表優秀賞 平成26年10月23日 「A Novel Peptide Sequence for Endosome Disruption Derived from Natural Hemolytic Peptide」 サントリー生命科学財団 生物有機科学研究所シンポジウム2014 ベストディスカッション賞 平成26年11月17日 	 黒崎 諒 平成26年6月5日 元素科学国際研究センター 無機先端機能化学 修士課程2年 粉体粉末冶金協会 優秀講演論文賞 「ペロブスカイトMn酸化物エピタキシャル薄膜触媒を用いた酸素還元反応の活性評価」 
 小倉 隆太郎 平成26年9月20日 環境物質化学研究系 分子微生物科学 修士課程2年 日本農芸化学会関西支部 第486回講演会 若手優秀発表賞 「低温菌 <i>Shewanella livingstonensis</i> Ac10 の細胞分裂部位に局在するエリコサペンタエン酸合成酵素の解析」 	 飯塚 英祐 平成26年10月15日 元素科学国際研究センター 遷移金属錯体化学 修士課程1年 第61回有機金属化学討論会 ポスター賞 「直接的アリール化重合によるジチエノシロール含有D-A型π共役系高分子の合成」 
 山田 一斗 平成26年6月26日 複合基盤化学研究系 分子集合解析 修士課程2年 応用物理学会関西支部 平成26年度第1回講演会ポスター賞(最優秀賞) 「低エネルギー逆光電子分光法による有機半導体薄膜の空準位の精密測定と分子配向依存性」 	 三原 知子 平成26年10月3日 バイオインフォマティクスセンター 化学生命科学 博士後期課程3年 第3回生命医薬情報学連合大会 ポスターデザイン賞 「Why Do Some Viruses Encode Amino Acid Biosynthetic Genes?」 

訃 報

竹中 亨 名誉教授ご逝去

竹中 亨先生は、平成26年7月26日逝去されました。享年85歳。

先生は昭和4年7月20日岡山県津山市にお生まれになり、同27年3月広島文理科大学物理学科を卒業され、同年京都大学大学院理学研究科物理学専攻に入学、同28年5月に化学研究所後藤研究室の助手に採用されました。昭和42年2月コロイド化学研究部門助教授、同46年4月同部門教授に昇任されました。改組により平成4年度から「界面物性研究部門I」の教授をつとめられたのち、同5年3月停年退官され、同年4月京都大学名誉教授の称号を受けられました。退職後は、平成5年4月に岡山理科大学理学部教授に赴き、8年間にわたり常勤の職



員として勤務されたのち、同13年4月から同学部非常勤講師としてさらに5年間勤められました。平成18年11月には中国東北師範大学に客座教授として招聘され、熱心に教育活動に取り組まれました。

この間、先生は固気・気液・液液界面における分子吸着種や有機超薄膜の構造解析に取り組まれ、この分野としては日本で初めて、赤外およびラマン分光法を導入し、現在でも基礎となる重要な研究成果を多数あげられました。また、表面増強ラマン分光法や表面増強赤外吸収分光法のような、測定の高感度化と表面選択律を併せ持つ分光学的手法の実用化にも大きな業績を残されました。

平成9年および10年には日本化学会のコロイド界面化学部会の第11期部会長もおつとめになりました。界面化学分野における分光物理化学の最前線を示した研究姿勢は、現在、研究者として活躍する多くの卒業生に大きな影響を与えました。

井上 雄三 名誉教授 ご逝去

井上雄三先生は、平成26年11月1日逝去されました。享年94歳。

先生は昭和21年9月京都帝国大学農学部農林化学科を卒業され、同大学大学院特別研究生を経て、同26年10月より京都大学農学部助手に採用され、同32年10月化学研究所へ移られたのち、同33年4月京都大学より農学博士の学位を授与されました。昭和37年1月京都大学化学研究所助教授、同48年3月同研究所教授に昇任され、植物化学研究部門をご担当、同58年4月1日停年により退官され、京都大学名誉教授の称号を受けられました。

先生は、永年にわたって天然物化学、有機立体化学、生物有機化学の研究と教育に邁進され、不斉合成のパイオニアの一人として、天然物の生理活性を有機立体化学の観点から深く追究されました。特に、除虫菊の殺虫成分であるピレトリン類の立体選択的完全合成を通して、その殺虫活性が光学異性に顕著に支配されていることを明らかにされ、これを基



盤とするピレトリンの化学は、今日の合成ピレスロイド系殺虫剤開発の基礎を築き、我が国の殺虫剤工業会の発展に指導的役割を果たされました。これらの業績により、昭和34年4月、社団法人日本農芸化学会より農芸化学賞を受賞されました。また、当時、黎明期にあった不斉合成について、その重要性和将来性を看破され、カルベノイドを用いた数々の不斉シクロプロパン化反応とその立体制御など、パイオニア的研究を多数遂行されました。その後、先生が予見されたとおり、医薬では単一の立体異性体を用いることが当たり前の時代が到来し、不斉合成が有機化学における一大分野に発展しました。また、先生は、酵素反応をシミュレートする不斉反応にも取り組まれ、アルコール脱水素酵素に匹敵する立体選択性を有するモデル化合物の開発に成功されました。これらの研究成果は国内外から高い評価を受け、生物有機化学の発展に大きく貢献されました。

先生は、教育の面においても優れた指導者として実力を発揮され、多方面における人材育成に尽力されました。これら一連の教育研究活動、学会活動により、平成6年4月に勲三等瑞宝章を受けられました。

事務部だより

宇治地区事務部 経理課課長
浅井 正彦

経理課長として二度目の節分を迎えるにあたって

一昨年の平成25年4月、岡田総務課長、岡本施設環境課長と共に着任しました経理課長の浅井でございます。小生の宇治地区勤務は二度目で前は昭和61年4月から平成元年5月まで化学研究所経理課経理掛に勤務させていただきました。小淵官房長官(当時)が行った「平成」の記者発表を土曜出勤している仕事の最中に見ていました。平成の初日である平成元年(1989)年1月7日は土曜日だったと記憶しています。他のほとんどの研究所に先駆け大部門制を導入した当時の化学研究所は、倉田所長から高浪所長への時代で、蹴上の都ホテルで挙行された化学研究所創立60周年記念式典、イオン線形加速器実験棟、電子線分光型超高分解能電子顕微鏡棟のしゅん功*等「祝賀行事」が立て続けに行われていました。また、経理掛員であった小生は、本学で初めてと思われる政府調達方式によるイオン線形加速器の製造請負契約に係る仕様書等を、今では全く考えられない政府調達用原稿用紙に「手書き」で作成していました。

時は流れ、平成13年4月から今度は経理部(当時)主計課第三予算掛長(研究所担当)とし

て、元素科学国際研究センターの設置に携わらせていただきました。年末の財務省原案内示の際、「機構(組織)・定員」要求のほぼ全てを認めていただいた際の感動は今でも忘れることはありません。あらためましてここに当時の玉尾所長以下化学研究所執行部及び宇治地区事務部の方々に厚く御礼申し上げる次第です。

昨年4月からは経理課長と防災研究所事務長との兼務となりましたが、経理課職員、防災研究所担当事務職員の絶大な協力を得て、両方の職務を遂行する充実した日々を送っております。

追って、経理課では業務のより一層の効率化を図る観点から、執行担当の掛を統合、予算担当掛と同じく各研究所の担当者を配置し、経理課として各研究所への対応が円滑に行えるよう取り組んでいます。

最後になりましたが、皆様方には今後共経理課への叱咤激烈ではなく、激励を賜りますようお願い申し上げます。

(*国立学校工事契約書の表記による)

編集後記

最近、駅伝がすっかりと冬の風物詩となっている。高校生の頃、冬の体育での3kmマラソンが嫌いで仕方なかった。途中で投げ出そうかと何度思ったことか。ところが、今は週末に近くの河原を10kmほどジョギングしたりしている。何とか少しでも体重増加を抑え体型を維持したいという不純な動機でも、目標を設定して少しずつでも重ねていくと、走れる距離が伸びていくのは驚きである。

さて、この例と較べるのは甚だ失礼ではあるが、本誌で紹介されている研究を見ると、皆さん、さすがに高い目標を持っているからこそ、着実に研究が進展しているのが良くわかる。特に学生を含めた若い人たちでも、高い目標を掲げ、熱意を持って研究に取り組んでいることが実に良く伝わってくる。広報誌「黄檗」を通して、このような化研の皆さんの活躍と進展をできるだけ広く伝えていければと願っている。

(文責:島川 祐一)

宇治URA室より

去る12月5日~6日のFD研修では、宇治URA室は準備段階から運営を支援し2日間の研修の末席に列しました。発表会で各研究室の研究内容や事務の各部署の担当用務について知ることができたのみならず、フリーディスカッションでは多くの方と自由なテーマで議論できました。普段は協働の機会がない方とも交流できる場に参加でき、感謝しております。帰所後のアンケートにも多数の回答をいただき恐縮です。



編集委員

広報委員会黄檗担当編集委員

栗原 達夫、寺西 利治、若宮 淳志、島川 祐一

化学研究所担当事務室

岡本 重人、大槻 薫、宮本 真理子、高橋 知世

化学研究所広報室

井上 純子、谷村 道子、濱岡 芽里、武平 時代

京都大学化学研究所 広報委員会

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄
TEL 0774-38-3344 FAX 0774-38-3014
URL http://www.kuicr.kyoto-u.ac.jp/index_j.html



化研点描

科学を志す若い方へ 学問は時代とともに細分化しながらより高度なレベルに進んでいきます。サイエンスを専門的に勉強し始めてから最先端の研究レベルに到達するのは、昔より大変かもしれませんが、一生懸命勉強して知識を習得し、早く第一線のレベルの話がわかるようになって下さい。自分のアイデアで仕事ができるようになって初めて見えてくる世界があります。

化学研究所で有機合成に没頭した研究生活。京都大学の産学連携組織の立ち上げに奔走した日々。大学人としての経験から学んだことや、化研への思いを年光教授に語っていただきました。 広報室 ★ 突撃！インタビュー

おいに学び、考え、チャレンジする 複合基盤化学研究系 学際連携融合 教授 年光 昭夫

研究生活のなかで思い出深い出来事は？

4回生で研究室配属になって以来、2002年に国際融合創造センター（後に産官学連携センターに改組）に移るまで、そして2011年から現在までを化研で過ごしてきました。そもそも京大で化学を学びたいと思ったのは、後にノーベル賞を受賞された福井謙一先生の影響があったからです。福井先生は量子化学で有機反応の仕組みを説明しようとしていました。量子化学の前に、まずは有機化学を学ばなければ、と思ったのが有機合成の分野に足を踏み入れるきっかけでした。はじめはあまり勉強熱心な学生ではなかったかもしれませんが、昼間はテニス、夜中に実験と自由にやらせてもらっていました。ところが博士課程の頃には有機化学が面白くてたまらなくなっていました。先生方や先輩の配慮も大きかったですね。たとえ未熟な考えのことであっても「試しにやってみよう」と背中を押していただきました。

一番印象に残っている研究は、セレンを含む有機化合物で、光学活性体ができるべきところをラセミ化したことです。その時は椅子から飛び上がるほどびっくりしました。試料などに間違いがないか、心を落ち着けて確かめたものです。このような予想外の反応を、研究生活において何度か自分の手で体験しました。偶然的な成り行きに感謝しています。

産学連携に携わって

京大が全学的に産学連携に取り組むことになり、私は2002年から国際融合創造センターの所属となりました。建物も何もなく、はじめは吉田キャンパスの空きスペースを間借りして運営していました。文字通りゼロからのスタートで、やらなければいけないことは何かとずいぶん考えました。京大の強みは基礎研究です。基礎レベルの技術は企業が使うことは難しいものですが、もし使いこなせれば基礎技術から実用レベルまでをカバーする非常に強い特許が取れます。そこを目指し、共同研究の意義や新しい可能性を教員に丁寧に説明していきました。

様々な経験を通して伝えたいことがあります。化研の皆さんには、研究の幅が広く多様性に富むという強みを生かし、今後もよりすばらしい研究を生み出してほしい。そのためには持っている技術を単に組み合わせるだけでなく、個々の分野で一歩も二歩も前進させた技術をコラボレートすることが重要だと思っています。

（取材・文 広報室 井上）



桂キャンパスにあるローム記念館の居室にて。ここは京都大学産官学連携センターが入っていた建物だ。後ろに見える木製の棚は壁面いっぱいに設置され、すべての扉に鍵がかかるようになっている。これは同センター長在任時、大量の特許関連の書類を厳重に管理していたためである。



セレンを含む有機化合物で、光学活性体ができるべきところ、ラセミ化していることを発見。この現象がなぜ起こるのかを追求するにはその後何年かを要した。その一連の研究をまとめた思い出深い論文、J. Am. Chem. Soc., 118, 2756-2757 (1996)。



現在ポケット・ゼミで「知識の習得と活用のメカニズム」を担当。趣味の囲碁を教材・手段とし、まったく初めて囲碁を始める人を対象に、人間がどのようにして知識を習得し、使いこなしていくのかを探っていく。「今後は、どのようにすれば人間の頭脳がその能力をより発揮できるのかについていろいろな分野の方と議論したいですね」。