



◆ Contents

2010年ノーベル化学賞

根岸 英一 教授 × ERL

21世紀のサイエンスを語る ..2

◆ 研究トピックス ..6

水中のタンパク質分子のねじれ運動を動画観測

岩塩構造をもつレアアースメタルの水素化合物を発見

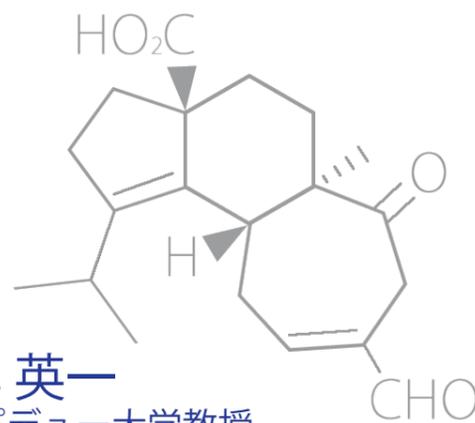
◆ 施設情報 ..7

cERL 建設状況
SPICA 初ビーム観測
超低速ミュオン
建設開始

◆ お知らせ ..8

物構研 新体制
第6回サマーチャレンジ
KEK 一般公開

24 ★
Purdue Univ.
根岸 英一



根岸 英一
米国パデュー大学教授

化学者。さまざまな形式の炭素-炭素結合を作る「クロスカップリング」を発展させ、触媒にパラジウム、つなぎ換えの目印にアルミニウム、亜鉛、ジルコニウム等を用い極めて正確に行う「根岸カップリング」を作り上げた。この業績により、2010年ノーベル化学賞を鈴木章氏、リチャード・ヘック氏とともに受賞。

根岸 英一 教授 × ERL 21世紀のサイエンスを語る



河田 洋
ELR 計画推進室長 / KEK 物構研教授

放射光を用いた新しい測定手法を開発。円偏光放射光を用いた磁気コンプトン散乱や共鳴磁気散乱の開発に従事し、物質の磁気構造を解明に貢献してきた。また、短パルス放射光源 PF-AR を牽引し、フォトンファクトリーにおけるダイナミクス研究拠点構築を手がけ、近年は、次期放射光源として計画している ERL の推進室長に従事。

持続可能な社会に向けて

3月14日、ERLシンポジウムが開催された。

ERL（エネルギー回収型ライナック）は次世代の放射光源としてKEKを中心に計画している新型の加速器で、実現すればサイエンスの可能性は大きく拓かれる。本シンポジウムでは、今後のサイエンスについて、第一線で活躍している研究者が一堂に会し、議論が展開された。

その中で特別基調講演をされた2010年ノーベル化学賞受賞者である根岸英一教授（米国パデュー大学）へのインタビュー。聞き手はERL計画推進室長の河田洋教授、物質科学をリードしてきた根岸教授に、測定、分析開発の立場から21世紀のサイエンスについて伺った。

河田：今日はERLシンポジウムに来ていただき、どうもありがとうございます。参加していただいて、どのような印象を持たれたでしょうか。

根岸：こちらの皆さんの専門の「測定」といったところは、私なんぞは素人の素人で、NMRにしても電子顕微鏡にしても「使う」側なんです。そういう分野と私どもの接点を探した時に、私が専門的な立場からどういう発言ができるかということ若干気にしていましたが、いわゆる化学や化学反応のことも非常に突っ込んだ議論が出ておりまして、いくつか非常に興味深い話がありました。参加させていただいて良かったと思っております。

河田：ありがとうございます。

根岸：正直言います、今聞いたばかりのお話（三菱化学・瀬戸山亨氏による講演^{*1}）は、私が考えているそのものずばりのことであって、もうここまで来ているというか...。まだ数字上の問題があるようですし、どのぐらいのスピードで伸びて行くかということとはわかりませんが、素晴らしい研究が行われていると思えましたね。こういうことがかなり進むと、学界の分野からは離れて企業の仕事になってくる、そうすると、学界の人間の出る幕はなくなってくるんですよ。

河田：いいえ先生、それはやっぱり基礎的なこと、基礎の反応プロセスなどをきっちり押さえておくというのは、必要なことだろうと思います。

根岸：まあそうですね。今私は極論を發したわけですが、学界の人間がやることはいくらでもあると思います。ただ、それを企業研究の実態を十分把握

しつつやっていく必要があるなということ強く感じました。

根岸カップリングの広がり 残った課題

河田：それではもう少し先生のご専門のところをお伺いします。今後、根岸先生が人工光合成に関するプロジェクトを立ち上げていこうとされていることについて、どういうビジョンをお持ちであるかということをお聞きしたいと思います。瀬戸山先生のご講演は、実際工業界ではこういう戦略でやっているというお話だったのですが、根岸先生のお立場ではどういったビジョンや戦略をお考えであるか、もっと言えば「根岸カップリング」をどう発展させていかれるのでしょうか。

根岸：最後のご質問に対してはクリアにお答えできます。根岸カップリング、つまりパラジウム触媒によるクロスカップリングは、有機化学史上、最も広範囲かつ選択的に応用できる反応だということ、非常に大きな自負を持っております。これがもっと応用できるのは間違いなく、製薬や高性能の電気材料といった応用面ではすでに実用化されて、採算ベースにも乗っています。だけど、それで全てかというところではない。不斉合成というのは、ある程度複雑な有機物になると必ずあります。C（炭素）の数が1や2ぐらいの簡単な有機物では不斉合成はあまり重要ではありませんが、炭素が3つや4つになりますと不斉点が必ず出てきます。例えばグルコースは炭素が6つありますが、そのうちの4つは不斉です。つまり2×2×2×2で16の単

糖類があるわけです。これらは、生物から見れば16種類のれっきとした違う化合物です。天然ではこのように不斉をコントロールしながらの合成をきちんとやっているわけですが、（人工的に実現するのは）まだ非常に難しい。実は100年も前、2番目のノーベル化学賞受賞者のドイツのエミール・フィッシャーという、おそらくはこれまでに存在した最も多才な有機化学者のひとりだと思いますが、この方がすでに先鞭を付けています。それにもかかわらず、まだまだ実用的な観点からするとまいものができていないですね。野依先生^{*2}、ノールズ先生^{*3}の「還元」はもう工業的にしっかりと根付いています。それからシャープレス先生^{*4}のエポキシレーションは本当に大規模で、医薬関係ではもう十分に使われていると思います。そういった酸化や還元という不斉の反応はかなり進歩していますが、炭素と炭素、いわゆるクロスカップリングのようなプロセスでの不斉はまだです。

不斉点というのは要するに右手左手の関係です。右手型のもので左手型のものは必ず光を反対の方向に回す性質があります。ほとんどの場合、それは別な化合物であると考えなければいけないわけです。

河田：サリドマイドはまさに右回りと左回りですね。

根岸：はいはい、あの場合は右手型がトランクライザーとして優れたもので、左手型は奇形を発生します。これは有機化学の最も基礎ではありますが、残された非常に大きな課題ですね。我々のチームの研究でも大きくとりあげるべきだと思っております。

—持続可能な社会に向けて—
第2回 ERLシンポジウム
The 2nd Energy Recovery Linac Symposium

ERL ができること、人にしかできないこと

河田：ERL シンポジウムですので、ERL に関することを。ERL というのは、時間的なダイナミクス、そして、空間的にこの場所で分子がどのように反応していくかを見たい、という要求のもとで、プロジェクトを進めています。根岸先生のお立場、主に合成の反応機構という分野から、ERL に対する期待はどのようなものがありますでしょうか？

根岸：我々の分野も含めて化学変化を扱う分野全てにおいて、当然行くべき、そして突き抜けてさらに上へ行くべきと言うか。リアルタイムで構造を見たい、動きを見たい、これは多くの分野の基礎的な要求だと思いますので、これが発達していくことは非常に重要だと思いますね。仮に初期投資額が高かったとしても、必ずやそれが発達すれば、後は使い道なども深く、広く、高く（笑）なってくるでしょうからね。私は非常に期待しています。それはそれとして、私どもが人工光合成を考える場合に、(ERL との) 接点はいくらでもあるわけですが、やはり、非常に素朴な、基礎的な、簡単なことを頭の中で使ってゲームをして、そこから出て来るものが当分の間さらに重要だと思いますね。

河田：頭の中でゲームをする、ですか？

根岸：例えば、リボソームの構造などは頭の中では構築できませんよね。まあ、見た絵をそこはかたく覚えておくことはできますけれども、で、例えばこの距離がいくらだということを使ってとか.. そういうリファインされたレベルではなくて..

河田：ああ、そういうことですか。例えばアダ・ヨナットさん⁵のリボソームの場合、mRNA がこう入ってきて.. のようなアニメーション的なものがあるわけですが、そういうことですね。

根岸：そうですね。ヨナットさんのお仕事などはかなり生化学的ですね。一口に言って、生化学的に突っ込んで

いこうとすると、すぐ構造の問題が出てきますね。かなり複雑な。その次に、その構造がどういうメカニズムを使って働いているか.. と考える。

我々の場合は、構造とメカニズムは非常に簡単なものにとどめて、こうとすればこういうことが起こるのではという、まあ悪く言えばゲームみたいなもので、基礎的なことをしっかりと踏まえて、予想を立てて。予想を立てるということは結局アイデアですので、必ずしもうまくいくとは限らないんですが。

河田：それは僕もすごく共感するところがあります。自分が研究していて、実験結果を見た時に、「どういうことが原因だとするとこれが起こるか」という仮説をいくつも立てられる、その能力が非常に重要です。

一番のマシンは・・・

根岸：実は最も生化学らしくない仕事が生化学で一番重要になっているんですね。例のクリック・ワトソンです。クリックさんやワトソンさんは、(DNA の) 構造のことはほとんどおやりになっていない。構造は他の方が解かれたわけですから。構造はこうわかってきた、ところがいったいこの構造が何なんだろうかということ、あの2人は、お酒を飲みながらかどうかわかりませんが、まあ何年かかかったか知りませんが、頭の推理力で、遺伝の原理まで行ってしまった。これが生化学を全部根底から組み直して、さらには犯罪学にまで応用されている

し、今では遺伝の原理に基づかない医学というのはほとんど考えられないですね。化学と生化学にはそういう違いを感じますね。生化学は、構造、それに基づいたメカニズムという、非常にリファインされたところから入る。合成化学や有機化学は、なんかもうゲーム感覚ですね（笑）。

河田：僕は合成化学は素人なのですが、触媒がある反応を起こしたときに価数がこう変わるとか、そのようなことは放射光を使って、あるいは何らかの分光学的な手法で得られると思うんですよ。

根岸：得られるんですが、そこに頼っていたら間に合わないんですね。例えば0から1になるのか、2になるのか、3になるのかというようなところが出てきた場合、初めてそういうもの(分光学的手法)が必要になってくるわけです。だから、現実に見たりお話を聴いたりして、ああ、ずいぶん毎日の仕事の内容には違うものがあるだろうなと、そう思いますね（笑）。

ですから、分析が進んでいるものについては、やはり、装置の性能を上げて、それによって構造解析をさらに精密に、速くする、ということだろうと思います。生物学になるとそのへんが非常に難しくなってくるでしょうね。複雑だから。私の分野では、とにかく簡単だからやってみようというか、こういうふうにやったらこうなるんじゃないかとか、アイデアとか発想のようなもの、そこには基礎的な量子力学とか、分子軌道理論とか、そういう非常に簡単なものが効くんですね。そこは(サイエンスは)多種多様で、それらが集まって全体のサイエンス体系ができていんだなあということを感じますね。

河田：根岸先生は、21世紀のサイエンスの広がりを考えたときに、社会的な問題、例えば今回のERL シンポジウムは「持続可能な社会に向けて」という副題を付けていますが、どういう分野にもっと我々後輩が力を入れるべきとお考えでしょうか？

根岸：やはり生物学でしょうか、今日の浅島先生のお話⁶を聞いていても、素晴らしいことがわかってきてはいるけれども、わからないことがまだかなりあるなあと。あんな複雑なものを扱

っておられるわけですから当然だと思うんですね。まだまだ進歩の余地が膨大にあるということを感じますね。

河田：もう少し抽象的な言い方をすると、生物に限らず、複雑系、不均一系の反応、あるいは動きや機能、そういうものを見て行くということですね。

根岸：広い意味での分析のテクニックがどんどん、少しずつ伸びて行くことですね。それと同時にやはり、その基礎の我々の一番いいマシンがここ(頭を指さす)にあるわけですから(笑)。

河田：後に続く我々やもっと下の世代の人間に対して、ちゃんと頭を磨いて、基礎的な洞察力を磨けよ、という非常に大きなメッセージだと受け取りました。今日は、非常に楽しく、先生のレクチャーを聴かせていただいたような感じがしています。どうもありがとうございました。

この記事は KEK ハイライト
<http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Highlights/>
でもご覧いただけます。

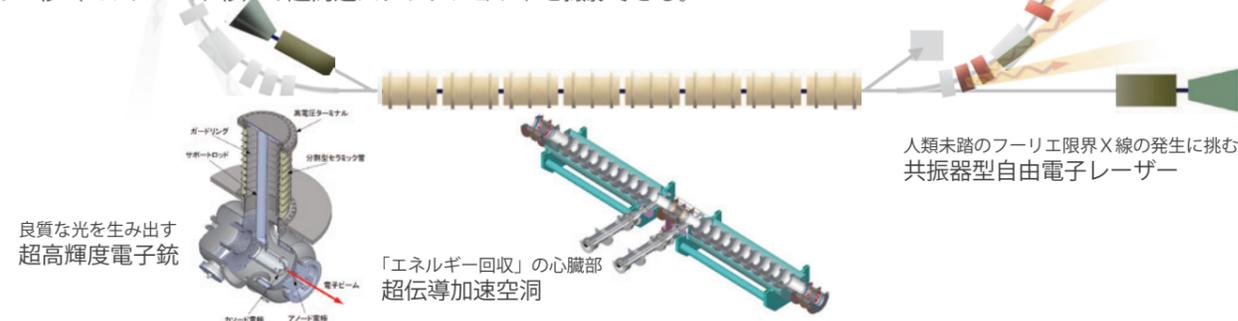


ERL の光の特性

ただ明るくだけではない「先端的な光」は何を見ることができるのか

ERL (エネルギー回収型ライナック) は、これまでの放射光を凌駕する高輝度性、短パルス性をもつ放射光を生み出す次世代放射光源。電子銃から入射された電子は超伝導加速空洞で加速され、放射光を出しながらリングを回る。一周して戻った電子はエネルギーが回収された後に廃棄され、リングには常に新しく高品質の電子が周回する。

ERL が作り出す光は輝度が現在の放射光より1~2桁高く、波面が揃っているため、回折限界まで集光でき、ナノビームを可能にする。また短パルス性の光は、10兆分の1秒(100フェムト秒)の超高速スナップショットを撮影できる。



脚注

- *1 「Green Sustainable Industrial Chemistry への取り組み —持続可能な社会へ向けた GSC 技術実用化への課題—」 瀬戸山 亨 (三菱化学・科学技術研究センター合成技術研究所)
- *2 野依良治。「キラル触媒による不斉水素化反応の研究」で2001年にノーベル化学賞を受賞。
- *3 ウィリアム・ノールズ。アメリカ合衆国の化学者。野依良治とともに2001年ノーベル化学賞を受賞。
- *4 パリー・ジャープレス。アメリカ合衆国の化学者。「キラル触媒による不斉酸化反応の研究」で2001年にノーベル化学賞を受賞。
- *5 アダ・ヨナット。イスラエルの結晶学者。「リボソームの構造の研究」で2009年にノーベル化学賞を受賞。1980~90年代にフォトンファクトリーで研究を行った。
- *6 「生命科学における課題と次世代放射光への期待」 浅島 誠 (産業技術総合研究所)

研究トピックス

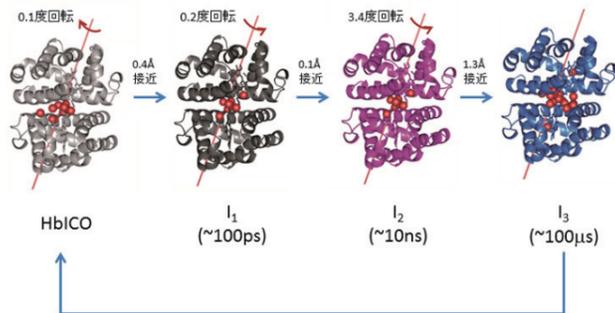
物構研、および PF、MLF の共同研究・共同利用による研究成果

■ もっと詳しく
KEK ニュースルーム
<http://www.kek.jp/ja/NewsRoom/>

生命

水中のタンパク質分子のねじれ運動を動画撮影

KAIST のイ・ヒョッチョル教授らの研究グループは、KEK 物構研の足立伸一教授、東京工業大学大学院理工学研究科の腰原伸也教授、および米国シカゴ大学の研究グループとの共同研究により、タンパク質分子が生体環境に極めて近い室温の水溶液中で、ねじれ運動する様子を 100 億分の 1 秒精度の X 線動画として直接観測した。



血液中で酸素分子を運搬するタンパク質であるヘモグロビン分子に短時間のレーザー光を照射し、照射後に進行するタンパク質の分子構造変化を、フォトンファクトリーの時間分解 X 線溶液散乱法によって追跡した。利用した二枚貝のヘモグロビンは、鉄-ポルフィリン錯体（ヘム）が収まっている二つのユニットが弱く結合した形をしており、鉄に酸素や一酸化炭素などのガス分子が可逆的に結合し運搬される。本研究では、試料にレーザー光を照射し、ヘモグロビン分子内のヘムと一酸化炭素の結合を切断して、瞬間的に一酸化炭素がタンパク質から解離した状態を作り出した。そして、この過渡的な状態から始まるタンパク質の構造変化を、時間分解 X 線溶液散乱法を用いて、レーザー光と X 線の時間を系統的にずらしながら逐次観測した。すると、ヘモグロビン分子が 100 億分の 1 秒（100 ピコ秒）から 100 分の 1 秒（10 ミリ秒）程度の時間内に徐々に構造変化し、二つのユニット間の距離が短くなるとともに、二つのユニットが相対的に約 3 度回転している様子が明らかとなった。溶液中のヘモグロビン分子が、ねじれ運動で形を変化させ、鉄に結合したガス分子を絞り出してゆく様子が、100 億分の 1 秒精度の X 線動画として直接観測されたのである（図）。

この手法は生体環境に極めて近い環境で、様々なタンパク質が実際に働く自然な姿を動画として捉えることを可能とする画期的な手法であり、生命活動にとって重要なタンパク質の分子機能を解析するための新技術として大いに期待される。本成果は、米国化学会誌 Journal of the American Chemical Society オンライン版で 2012 年 4 月 12 日に掲載された。

材料

岩塩構造をもつレアアースメタルの水素化物を発見

日本原子力研究開発機構の町田晃彦 副主任研究員らの研究グループは、KEK 物構研の大友季哉教授らの研究グループ、J-PARC センター、広島大学、東京大学、ケンブリッジ大学（英国）と共同で、レアアースメタルの水素化物の結晶構造を、J-PARC の大強度中性子線と大型放射光施設 SPring-8 を用いて解明した。その結果、これまでなかった NaCl 構造をもつ希土類金属の 1 水素化物（LaH）の存在を発見した。

希土類金属である希土類金属は水素との親和性が極めて高く、水素を多量に吸収して水素との化合物（水素化物）を形成する。水素原子が金属格子の隙間に入り込むことで、水素の吸蔵・放出するため、水素貯蔵材料の構成材料として注目されている。通常、水素原子は初めに金属格子の四面体サイトのみを占有して 2 水素化物を形成、次に八面体サイトを占有し金属格子の隙間が飽和した 3 水素化物を形成する（図）。八面体サイトのみが水素で占有された 1 水素化物は、これまで希土類金属では報告されていなかった。

研究グループでは、代表的な希土類金属であるランタン（La）の 2 水素化物（LaH₂）が 10 万気圧超の圧力下で、高水素濃度と低水素濃度の 2 種類の状態をとることを見出していた。今回、J-PARC の物質・生命科学実験施設にて水素（H）を重水素（D）に置き換えた 2 水素化物（LaD₂）の中性子回折実験を高圧力下で実施し、3 水素化物（LaD₃）に近い水素化物と低重水素濃度の 1 水素化物（LaD）の形成を初めて観測した。LaD は八面体サイトのみが重水素原子で占有された NaCl 構造をしており、その 1 水素化物（LaH/LaD）が高圧力下で安定に存在できることを第一原理計算によって示した。



この発見によって、希土類金属は全ての金属の中で唯一、1 水素化物、2 水素化物および 3 水素化物という 3 つの状態を形成し、それらの金属格子構造が全て面心立方構造であることが示された。希土類金属は水素貯蔵材料の構成元素として広く利用されており、今後、水素化物中の水素と金属の結合状態を詳細に調べることで、水素と金属の相互作用の解明、さらには高濃度の水素を吸収する希土類合金の開発指針が得られると期待される。本成果は、米国科学雑誌 Physical Review Letters オンライン版に掲載される予定である。

施設情報

放射光 cERL 建設状況

KEK が次世代放射光源として検討を進めている ERL（エネルギー回収型ライナック）の実証器であるコンパクト ERL（cERL）の建設が順調に進んでいる。

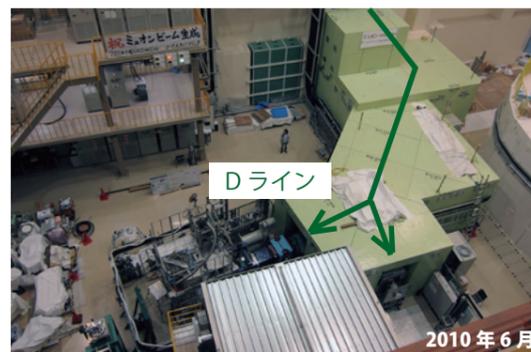
ERL 開発棟では放射線シールド用コンクリートが次々と建てられ、並行して電子ビームの入射器用クライオモジュールの組み立てが、同棟内クリーンルームで行われている（下図）。2012 年度の cERL 運転開始を目指し、建設チームは忙しく働いている。



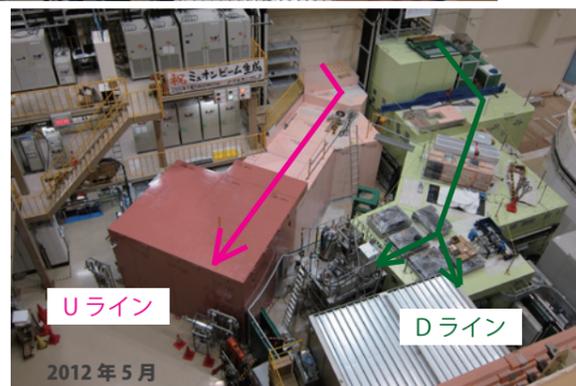
入射器用超伝導空洞モジュールの組み立て作業

ミュオンUライン 超低速ミュオン

2010 年度から J-PARC の物質・生命科学実験施設（MLF）に建設されている大強度超低速ミュオン専用ビームライン。超低速ミュオン発生装置超低速ミュオン発生装置を格納するシールドエリアや、大強度ライマン α レーザーシステムを設置するクリーンルームが建設されている。このレーザーシステムにより熱ミュオニウムがイオン化され、超低速ミュオンが得られる。このほか、ユーザーのための実験環境も整備が進められている。



2010年6月



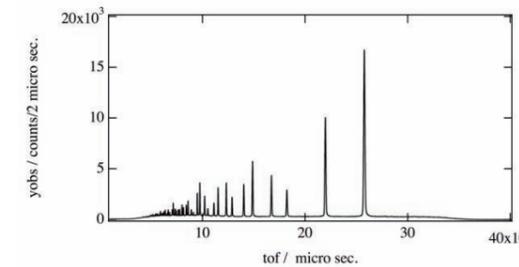
2012年5月

中性子ビームライン BL09 SPICA 初ビーム観測

2月9日、J-PARCの物質・生命科学実験施設（MLF）にて建設されている中性子のビームライン BL09、SPICA（スピカ）に中性子ビームを導入、観測した（右図）。また3月



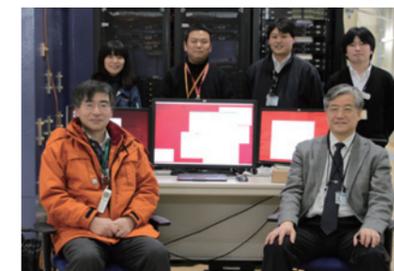
17日には、導入した中性子ビームを利用して爆縮ダイヤモンドの回折線の観測に成功した（下図）。現在6月以降の本格的なコミッションング作業に向け、準備が進められている。



BL09 初の回折図形（爆縮ダイヤモンド、L1=52m、L2=1m、分解能 0.5%）

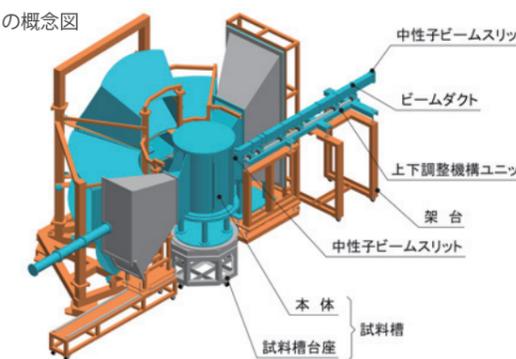
SPICA は材料に中性子ビームを照射した際に現れる干渉縞から蓄電池材料中の原子配列を調べられる。中性子はリチウムなどの軽元素を効率良く観察できるため、この装置で得られたデータから現在広く利用されているリチウム二次電池中の化学反応機構の解明など、構造という視点から蓄電池材料の基礎研究から応用研究の広い分野の研究推進が期待されている。特にこの装置では、高温・低温、ガス中、磁場、電場など様々な環境下でその材料のその場（in situ）測定が可能。これらの試料環境装置を今後整備予定。

SPICA は独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の革新型蓄電池先端科学基礎研究事業（RISING 事業）によって建設が進められている。



初回折測定後の記念写真
前列左から：神山崇 教授（KEK）、福永俊晴教授（京大）
後列左から：長尾美紀 特任助教（KEK）、米村雅雄 特任助教（KEK）、森一広 准教授（京大）、小野寺陽平（京大）。

SPICA の概念図



お知らせ

物質構造科学研究所 新体制

平成 24 年 4 月 1 日より、以下の新体制となりました。

所 長：山田 和芳

副所長：若槻 壮市

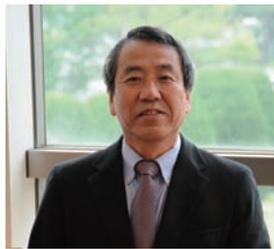
放射光科学研究施設長：村上 洋一

研究主幹：放射光科学第一研究系 伊藤 健二

放射光科学第二研究系 足立 伸一

中性子科学研究系 大友 季哉

ミュオン科学研究系 門野 良典



山田 和芳 物構研所長

研究センター長：構造生物学研究センター 若槻 壮市

構造物性研究センター 村上 洋一

室長：計測システム開発室 岸本 俊二

ロゴマークの決定

物構研のロゴマークが決まりました。



このマークは、物構研の特徴である、放射光・中性子・ミュオン・低速陽電子の4つのプローブをモチーフにしたものです。中央に集まっているようにも、外に広がっているようにも見えるデザインは、知を集約し、物質の構造を解明し、その情報を社会に発信する、という物構研のミッションを表現しています。

イベント予定

8/20 (月) ~ 28 (日)

第6回 サマーチャレンジ 「この夏、豹変する」

研究最前線で活躍する研究者と共に実験や解析、最終日には全員が研究成果発表する、研究を9日間にわたって体験するプログラム。

対象：主に大学3年生

定員：90名程度

(素粒子・原子核コース：60名、

物質・生命コース：30名程度)

参加費：無料

申込み：5/18 (金) 締め切り

>> <http://ksc.kek.jp/>



9/2 (日)

KEK 一般公開

KEKのつくばキャンパスを公開。普段は見ることのできない実験施設を見学、講演や体験イベントなど科学技術に直接触れることができます。