

こんにちは、2021 年 3 月より Harvard University, Department of Chemistry and Chemical Biology の Eric N. Jacobsen 研究室においてポスドクとして働いている磯村真由子と申します。

研究室に所属して早くも 8 カ月経ちました。この秋は、いよいよこの研究室の得意としており、自分がこの研究室をポスドク先に選んだきっかけとなった、物理有機化学を用いた反応機構の解明に本格的に取り組みました。思ったような結果が得られなかったり、進捗報告のたびに予想もしない質問を受けてなかなか辛い期間でしたが、毎日学ぶことがたくさんあり非常に充実した期間になりました。

具体的には速度論的同位体効果(Kinetic Isotope Effect)の測定・React IR の測定・コンピューターを用いた DFT(Density Functional Theory)計算などを行いました。速度論的同位体効果とは、化学反応に関わる基質を構成する原子の一部をその同位体(H/D や  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ )に置き換えることでどの程度反応の速度が変わるかを測定し、その化学反応の反応機構を明らかにしようとするものです。その値を出すにあたって Excel で計算をして、基礎統計で学んだ誤差の計算式をととても久しぶりに用いました…。ReactIR は反応を赤外線吸収スペクトルの変化から追跡しようというもので、NMR や MS が小分子化合物測定の主流となっている今、意外と IR も使えるなあ、とその重要性を再確認しました。そして最後に DFT 計算です。Gaussian というソフトを用いて分子のエネルギーの計算をすることによって分子の基底構造、遷移状態構造などを探索することができます。最近のコンピューターの発達により昔と比べて複雑な構造(分子量が大きい分子触媒との相互作用など)の計算が気軽に行えるようになりました。今回は現在開発している反応の機構について、上で紹介した実験による機構解明の結果をサポートする目的で計算を用いました。つまり、既にある程度反応性が分かっている反応を対象としたわけですが、まだ実際に開発を始めていない未知の反応の設計にも DFT 計算は非常に役に立ちます。例えば同僚のポスドクの一人は現在アカデミアのポジションに応募していますが、その出願の際に必要なプロポーザルの妥当性を DFT 計算で示していました。このように計算は化学の研究を支える大きな柱の一つになりつつあり、その基礎を早速学べたことはこれから自分の将来に大きなメリットになると感じました。

他には、私が現在の研究室に所属して初めての Ph.D.学生のディフェンスがありました。公开发表→ディフェンス→パーティーとおおまかなスケジュールは同じですが、今の研究室ではディフェンス後のパーティーも同じ日に研究室メンバー準備して行いました(博士課程で在籍していたスイスでは当日は小さい集まりだけで、数日後に Ph.D.を取った本人が大きなパーティーを準備してメンバーを招待という形をとる)。一時的にコロナによる規制も緩和した頃で、大人数が一つの部屋に集まってワイワイするのは久しぶりの事で、やはりパーティーはオンラインより対面がいいなと思いました。

大学のあるボストンの街は 11 月はじめ紅葉がとても綺麗で、週末はふらふらとお散歩してこの素敵な季節を堪能しました。早くも街の散策もだいぶ進み、新しいお友達の輪も広がり、美味しい日本食やラーメンも頂きました！ただすでに冬は着実にやってきていて、夜は氷点

下になる日も増えました。またあの豪雪・暴風の日を迎えるのか...と今から戦々恐々としていますが、今回はもっと楽しみを見つけられたらいいなと思っています。

このように、コロナの影響などにより慣れるのに少し時間を要しましたが、アメリカポストドク生活最初の一年はとても充実したものとなりました。2年目はすこしずつ次のポジションについて考えなくてはいけなく、プレッシャーも多くなるのだろうと予想されますが、焦らず、今やりたいことが出来ている事に感謝して、楽しむことを忘れずに頑張ろうと思います。

最後になりましたが、長年にわたり金銭的・精神的にご支援くださっている船井財団の皆さんにはこの場をお借りして厚く御礼申し上げます。



上左：Harvard Yard と紅葉

上右：札幌ラーメン。おいしかったです！

下：同僚の Ph.D.お祝い。Science にも論文がでました。本当におめでとう！！！！