



第 2 回全体合宿会議 開催報告

水谷 泰久 (阪大院理・総括班)

本新学術領域研究の第2回全体合宿会議が、平成 25 年 12 月 5 日 (木) ~7 日 (土) に、長浜ロイヤルホテル (滋賀県長浜市) で開催された。本会議には 57 名の参加者があり、口頭発表 10 件、ポスター発表 52 件による研究構想発表および研究紹介が行われた。

最初に、田原太平領域代表から、本新学術領域研究の全体についての講演が行われ、領域全体として目指す方向、運営方針について詳しい説明がなされた。“実”のあることをしよう、将来につながることをしよう、“好き”なことをしようというシンプルかつ強いメッセージが述べられた。続いて、北尾彰朗氏 (東大分生研) が、タンパク質の動的特性についてシミュレーションを用いて研究する構想を述べた。田原太平氏 (理研) は、これまでのご自身の研究の流れを説明した後、新しく開発された二次元蛍光相関分光法についてその原理から最新の実験データについてまで説明した。森田明弘氏 (東北大院理) は、液体水界面の pH に関する最近の研究をレビューされた。

夕食では湖北エリアを代表する冬の味覚である鴨料理を味わいリフレッシュした後、午後 8 時からポスター発表が行われ、白熱した討論が 12 時近くまで続いた。また、会場では北尾グループのお世話により、ハプティックデバイスの実演が行われた。画面上の原子をペンで引っ張ると、分子弹性に応じた復元力がペンに加わる仕組みになっており、分子の柔らかさを体感することができた。これは今後のアウトリーチ活動においても活用できそうである。

会議二日目では、神取秀樹氏 (名工大院工) がレナルタンパク質およびフラビンタンパク質に関する機能改変の研究成果と構想について説明した。タンパク質の機能改変をどのように設計するかについて理論研究と計測研究に対する挑戦的な期待が述べられた。また、タンパク質中の水素結合ネットワークの硬さと柔らかさについて議論した。続いて林重彦氏 (京大院理) は ATP 合成酵素、Ras タンパク質-GAP (GTPase 活性化タンパク質) 複合体、カルモジュリン N 末端ドメインについて、QM/MM 法によるアプローチを説明した。また、計算科学から見たタンパク質分子の柔らかさについても述べた。休憩をはさみ、水谷泰久 (阪大院理) は、共鳴ラマン分光法を用いたタンパク質ダ

イナミクスの研究構想を、構造変化およびエネルギーフローの二点を中心に説明した。また、タンパク質のアロステリックダイナミクスが、タンパク質の硬さに基づいた柔らかさに由来するという考えを述べた。高橋聰氏 (東北大多元研) は、タンパク質分子の柔らかさを折れ疊み問題の観点から議論した。

お昼の時間には、昼食をとりながらの班会議が三つの研究項目に分かれて行われた。ここでは、各研究代表者から共同研究に関する現状報告が行われたほか、班長から本新学術領域研究の特徴ある取組 (若手研究者海外派遣支援、ワークショップ開催) について説明があり、来年度以降の積極的な活用が呼びかけられた。午後は自由討論を行い、夕食後は再び深夜までポスター発表を行った。前日もそうであったが、学生同士のディスカッションが目立った点に頼もしさを感じた。

会議最終日では、藤井正明氏 (東工大ソ機構/資源研) から気相分子クラスターについて、分子の安定なコンフォーマー数を類似の分子で系統的に調べた研究成果と今後の研究構想が述べられた。水素結合した水分子の個数と分子の柔らかさの関係についても議論した。中西尚志氏 (物質・材料研究機構) は、同一分子からの自己組織化構造の多様性についてこれまでの成果を紹介し、今後の構想を共同研究案も含め述べた。また、柔らかな媒質から生まれる分子機能についても議論した。村橋哲郎氏 (分子研) は、有機多金属複合体について、柔らかさを活かした機能創成について議論した。その後、分子系の柔らかさについて全体討論を行った後、神取氏から共同研究、藤井氏から今後の行事予定、北尾氏からアウトリーチ活動についてのアナウンスがあり、田原代表の挨拶で会議を閉じた。

冬の訪れを感じる琵琶湖畔の落ち着いた雰囲気のもとで、3 日間サイエンスを楽しむことができ、大いに刺激となつた。最後に、本会議の開催準備、進行を手伝ってくれた阪大水谷研究室のスタッフと学生諸氏に感謝する。





A02 計画班の宮崎充彦さんが日本分光学会奨励賞を受賞

藤井 正明（東工大・A02 計画班）

平成 25 年 11 月 20 日、東京工業大学フェライト会議室にて開催された日本分光学会総会において、宮崎充彦さん（A02 計画班研究分担者、東工大資源研・助教）が日本分光学会賞（奨励賞）を受賞しました。ここに心よりお祝い申し上げます。

日本分光学会賞（奨励賞）は分光学およびその関連分野に関する優れた研究成果を得た満 39 才未満の若手研究者を対象とする賞であり、分光学を担う次世代に与えられる賞です。宮崎さんは「ナノ秒及びピコ秒時間分解赤外分光法による分子クラスター内反応の研究」という研究業績で受賞されました。宮崎さんは大サイズ水分子クラスターの赤外分光に依る構造解析法を発見した業績で良く知られているのですが、この受賞は構造研究から一步踏み出したもので、ここ数年精力的に取り組んでいる分光学に立脚した化学反応機構の研究に対して与えられたものです。宮崎さんはフェムトケミストリーなど超高速レーザーを用いた従来の化学反応研究に対し、不確定性原理による波長分解能の欠如が実在分子系にとって深刻な問題であるとの問題意識を抱き、時間分解能とエネルギー分解能を両立させたピコ秒時間分解赤外分光法を開発しました。これにより分子クラスター内の溶媒再配向運動など柔らかな分子系での化学反応がどのように進行するのか実時間で観測する事に初めて成功しました。さらに、中赤外レーザー分光法とそれに必要なレーザーを開発する事で水素結合形成に依る振動バンドのプロードニングの影響を回避することに成功し、酸解離という基本的な化学反応素過程に溶媒が何分子必要なのか、初めて明らかにしました。このような方法論は柔らかな分子系のダイナミクスを捉える上で大変有用で、本領域にとても重要と考えられます。以下、内容をご紹介します。

1. 水和クラスターの光イオン化誘起水分子異性化の実時間観測

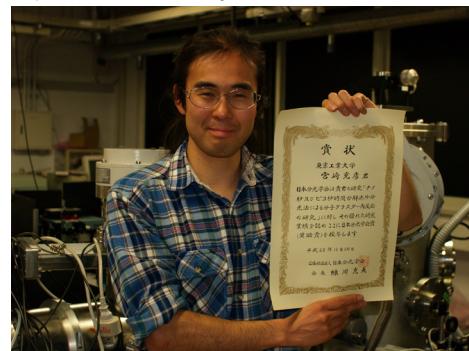
宮崎さんは 3 台の波長可変高強度ピコ秒レーザーを利用した状態選択的な時間分解赤外分光をアセトアリド - 水クラスターへ適用し、光励起（イオン化）による単一の水分子の再配向運動を実時間で観測することに世界で初めて成功しました。この結果は基質の光励起による第一溶媒和圏の水分子の配向反転ダイナミ

クスを分子レベルで実測したものであり、分子動力学シミュレーションのベンチマークとしても非常に重要です。宮崎さんの手法は赤外スペクトル全体の時間変化を捉えるため反応経路全体の情報が「可視化」されるに等しく、溶媒和ダイナミクスや大きな分子系での化学反応追跡の強力な手段である事がこれから実証されました。化学反応を個別の分子の動きで実時間追跡する研究は今後の発展が大いに期待されます。

2. 中赤外レーザー光源の開発と赤外分光によるクラスター内反応研究

宮崎さんはレーザー工学研究者と共同で新規非線形光学結晶 ZnGeP₂による中赤外高強度波長可変レーザー光源を開発し、その超音速ジェット赤外分光法への応用を世界に先駆けて進めました。光源そのものの分解能と出力も世界最高性能であり、レーザー工学からも高く評価されています。この中赤外レーザーは酸塩基対のプロトタイプであるフェノール - アンモニアクラスターの反応研究に用いられ、フェノレートアニオンの生成を中赤外スペクトルにより初めて検出しました。これによりフェノールが酸解離を起こすにはアンモニアが最低 6 分子必要であることを捉える事に成功し、化学反応研究に対する中赤外レーザー分光の有用性を実証しました。

余談ですが、宮崎さんはマンチェスター大との国際共同研究のため本賞の授賞式に参加できなかったのですが、分光学会運営委員の先生方は「授賞式に出られないくらい海外で活躍している方が若手らしく元気があって良い」とおっしゃり欠席をご寛恕下さったそうです。先生方のご寛大なお心に感謝申し上げますとともに、宮崎さんが世界を股にかけて益々ご活躍されることを期待しております。



受賞を喜ぶ実験中の宮崎充彦さん



神取グループの伊藤獎太さんが Award of Young Scientist を受賞

岩田 達也（名工大・A03 計画研究連携研究者）

A03 計画班神取グループ（名工大）研究協力者の伊藤獎太さん（修士課程 2 年）が、平成 25 年 11 月 10 日（日）から 13 日（水）までシドニーで開催された The 6th Asia & Oceania Conference on Photobiology（第 6 回アジア・オセアニア光生物学会議、AOCP2013）で Award of Young Scientist を受賞しました。

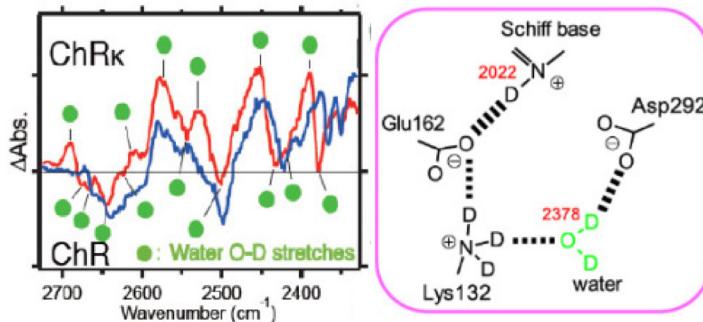
伊藤さんの研究対象はチャネルロドプシン（ChR）という膜タンパク質で、2002 年に緑藻 *Chlamydomonas reinhardtii* から発見されました。ChR は「チャネル」の名が示すとおり、ナトリウムイオンなどの陽イオンを濃度勾配に従って輸送する機能をもっています。また、「ロドプシン」の名が示すように、光を吸収するレチナール分子を結合し光受容体として機能しています。つまり ChR は光刺激によって陽イオンを濃度勾配に従って輸送する機能を有しています。

ChR は我々の視覚のように緑藻で走光性を司る光センサーとして機能していますが、最近では本来の機能を超えてツールとして利用されることとなりました。それは、ChR を脳神経に発現させ、光のオンオフで神経を活性化させることです。神経細胞に限らず、細胞は内外でイオン組成が異なり、細胞内外に對して負の電位にあります（分極状態）。神経細胞では入力された刺激に対してこの電位を変化させることで他の細胞に情報を伝達します。一般に神経細胞は膜電位をゼロに近づける（脱分極）ことで興奮性のシグナルを、電位差を負に増加させる（過分極）ことで抑制性のシグナルを伝達します。すなわち、ChR は光刺激により陽イオンを細胞内に輸送することで、神経細胞を脱分極

させる（興奮させる）ことが出来るのです。オプトジェネティクスと呼ばれるこの新しい技術は脳科学研究の発展に大きく貢献しています。

一方で、ChR がどのようにして陽イオンを輸送するかについてのメカニズムについては、理解が進んでおらず、ツールの改良のためにも基礎研究が急がれています。その中でも、ChR の X 線結晶構造解析の報告 (Kato et al. *Nature* **482**, 369-374 (2012)) では、立体構造の情報と共にレチナール付近にまで陽イオンの通り道が関わっていると推定され、大きな進展となりました。私たちは X 線結晶構造解析を実現した東大院理の瀧木先生のグループと共同で分光研究を開始しました。今回伊藤さんは、野生型と 3 種類の変異体 ChR に対する赤外分光法により、原子レベルで ChR の構造解析を行いました。赤外分光法はレチナールやタンパク質の主鎖、側鎖から特異的に結合した水分子に至るまで原子振動を解析することができる手法です。中でも神取研の得意技である水素結合供与基 (O-H と N-H、重水中：O-D と N-D) を解析することにより、水素結合ネットワークまで踏み込んだ議論が可能となります。伊藤さんは、ChR の赤外分光解析の結果からレチナールがその周辺のアミノ酸と特異的なネットワークを形成していることを見つけ、陽イオン輸送のためのタンパク質の構造変化を誘起している可能性を示しました。

今回の AOCP2013 では Vision、Plant Photobiology、Photomedicine の三分野の講演があり、伊藤さんは Vision 分野での発表を行い、受賞に至りました。今回の渡航に関して伊藤さんは本新学術領域研究から助成を受けましたが、それに見合った発表をしてきたのではないかと思っております。



左図：伊藤さんが測定した赤外スペクトル（水素結合供与基領域）と ChR の特異的な水素結合ネットワークモデル

右図：Award of Young Scientist を受賞し喜ぶ伊藤さん





6th Asia & Oceania Conference on Photobiology 参加報告

伊藤 優太（名工大・A03 計画研究協力者 M2）

2013 年 11 月 10 日から 13 日までシドニーで行われた Asia & Oceania Conference on Photobiology (AOCP) に D1 の山田大智さん、助教の岩田達也先生と参加しました。今回の海外渡航にあたって、本新学術領域から若手研究者の研究促進のため旅費支援をしていただきました。この場をお借りして感謝申し上げます。

AOCP は、アジア・オセアニア光生物協会が主催し 2002 年から開催されている、光生物を研究している研究者が一同に会する国際会議です。Plant Photobiology、Vision、Photomedicine と 3 つのテーマのもと、多種多様な最先端の発表が行われる一方で、Award of Young Scientist という学生を対象とした賞を設け、若手研究者の口頭発表を奨励しています。

私は「Channelrhodopsin, a light gated ion channel, has the specific hydrogen-bond network around the retinal Schiff base (光駆動のカチオンチャネル、チャネルロドプシン (ChR) におけるレチナールシップ塩基近傍の特異的な水素結合ネットワーク)」という題目で、東大院理・瀧木研との共同研究の成果を Vision の分野で口頭発表しました。今回の発表では、単離精製した ChR に対して、光を吸収するレチナール発色団近傍の詳細な構造情報や水素結合ネットワークについて赤外スペクトルをもとに議論しました。レチナール近傍に存在し光反応に関わる水分子が多いこと、レチナールシップ塩基が対イオンと呼ばれる脱プロトン化したカルボン酸と直接水素結合していることなど、他の微生物型ロドプシンにはみられない ChR の特徴はチャネル機能のためのタンパク質の構造変化に影響を与えているとと考えられます。私自身、初めての海外での発表とい

うこともあり緊張はしましたが、質疑応答まで含めてしっかりと自身の研究成果を伝えることができました。さらに光栄なことに Award of Young Scientist をいただくことができました。同年代の若手研究者がいずれも活発で優秀な発表を行っている中での受賞は、自分がこれから研究を続けていく中での自信となりますし、よいモチベーションになります。

本新学術領域からの旅費支援にあたっては、領域代表の田原先生から「旅費支援は人材育成が目的なので、外国人と何も議論せずただ発表を聞いて帰国する、というような海外出張はせず、少なくとも質問の一つぐらいはするように心がけ、またできれば学会の前後に興味のある大学の研究室を訪問して見聞を広めるようなことを推奨する。」という若手研究者に対する熱いメッセージをいただきました。会議中に山田さんは 2 回、私は 1 回、質問をしましたが、普段から外国人のセミナーなどで質問していますので、特段の緊張はありませんでした。一方、我々の研究分野にはオーストラリアで訪問すべき適当な研究室がなく困りましたが、研究室で使用している赤外分光器の製造企業 Agilent Technologies 社の工場がメルボルンにあることからそこを訪問することにしました。当地では、赤外分光器の制作過程を間近に見るだけでなく、運よく、(本新学術領域研究の予算で) 神取研究室が新たに導入する近赤外分光器の製品チェックの現場にも立ち会うという稀な体験ができました(神取先生に羨ましがれました)。専門の技術者の方と分光器の性質や改良点などについて話すことができ、今後の研究に繋がっていく得難い経験となりました。

今回の海外での体験を今後の研究活動に活かせるよう、より一層研究に邁進していきたいと思います。

