



第 4 回ワークショップ和周波分光 開催報告

石橋 孝章（筑波大数理物質・A02 公募研究代表者）

第 4 回ワークショップ和周波分光・第 6 回 SFG 研究会が、平成 26 年 8 月 2 日・3 日の 2 日間、筑波大学筑波キャンパスにおいて開催された。本ワークショップは、国内の和周波発生（SFG）分光法の研究者が一堂に集まり、物質科学から生命科学まで応用分野の垣根を取り払って議論を深めるという目的で開催された。今回は、特に国内の各 SFG 研究グループに推薦を依頼し、多くの若手研究者に講演をお願いした。

ワークショップでは、口頭発表 11 件、ポスター発表 8 件、石山達也氏（富山大院理工、A01 研究分担者）による振動 SFG 分光のシミュレーションについての特別講義、SFG 周辺分野からの特別講演として多田博一氏（大阪大学基礎工）による分子エレクトロニクスの最新状況に関する総合講演があり、活発な質疑応答が繰り広げられた。総参加者数は 55 名。発表の分野は、理論・シミュレーション（口頭 2 件、ポスター 1 件）、気液界面（口頭 2 件、ポスター 1 件）、高分子および生体界面（口頭 3 件、ポスター 3 件）、固体および固体界面（口頭 3 件、ポスター 3 件）、分子キラリティ（口頭 1 件）と多岐にわたり、SFG 分光の応用範囲の広がりを反映しているようであった。以下にワークショップの発表題目および発表者を記す。

口頭発表 8 月 2 日

- ・（特別講義）液体界面の分子動力学シミュレーション：振動和周波スペクトルから何がみえるのか？（富山大院理工）石山達也
- ・塩基性水溶液表面における和周波分光の理論解析 — OH- は表面活性か —（東北大院理）森田明弘
- ・固液界面分極効果の分子モデルと、水/酸化チタン界面での構造とダイナミクス（産総研）中村恒夫
- ・異種相界面における高分子鎖の局所コンフォメーション（九大院工）田中敬二
- ・振動分光法による生体モデル界面の構造に関する研究（物材機構 WPI-MANA）張雅
- ・ピコ秒 IV-SFG 法を用いたジカチオニオン液体表面の長時間緩和過程の観測（名大 VBL）酒井康成
- 2 次元ヘテロダイイン検出 VSFG を用いた両性イオン脂質/水界面のフェムト秒振動ダイナミクスの研究（理研・田原分子分光）井上賢一

口頭発表 8 月 3 日

- ・ヘテロダイイン検出振動和周波発生による分子キラリティー決定（筑波大数理物質）奥野将成、石橋孝章
- ・VSFG 検出赤外超解像顕微鏡法による毛髪 α-ケラチン

の分子配向イメージング（東工大資源研）酒井誠

・和周波発生で観る埋もれた界面の機能（産総研）宮前孝行

・（特別講演）単一分子エレクトロニクスの進展（阪大院基礎工）多田博一

・ジャスト及びステップ H-Si(111)表面の SFG 分光と SFG 顕微鏡観察（北陸先端大院）Khuat Thi Thu Hien

・Pt(111)表面上の薄膜氷の強誘電性と常誘電転移（京大院理）杉本敏樹

ポスター発表 8 月 3 日

・二重共鳴和周波発生分光法による電極/溶液界面電子・分子構造解析への試み（北大院総合化学）Shuo Yang

・水表面の構造と変角振動スペクトルの分子動力学研究（東北大院理）田中翔悟

・赤外超解像イメージングによる毛髪 α-ケラチンの分子配向観察～アミド I バンドの偏光依存性測定～（東工大資源研）牛尾公平

・Ir(111)表面上のグラフェンにインターラートした Cs のコヒーレント振動（京大院理）渡邊一也

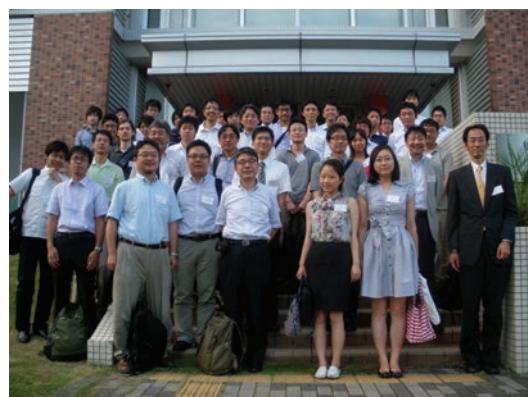
・共焦点光和周波顕微鏡によるコガネムシ翅膀の観察（北陸先端大院）MD Abdus Sattar

・H-Si(111)表面からの水素脱離の SFG による観察（北陸先端大院）西田貴博

・立体規則性の異なる PNiPAm 薄膜のヘテロダイイン検出振動和周波発生分光（筑波大数理物質）深谷和玄

・液体界面の超高速分光：時間分解ヘテロダイイン検出振動和周波発生分光の開発と応用（理研・田原分子分光）田原太平

ワークショップの企画に関して、大内幸雄氏（東工大）、宮前孝行氏（産総研）、森田明弘氏（東北大、A01 研究代表者）にご助言いただいた。また、筑波大学数理物質系化学域物理化学研究室のスタッフと学生には、会場設営撤去、会の進行をお手伝いいただいた。これらの方々に、この場を借りて感謝したい。



第 4 回ワークショップ和周波分光 集合写真



業績紹介：時間依存線型応答理論によるリガンドに誘起されるタンパク質応答の研究

北尾 彰朗（東大分生研・A01 計画研究代表者）

論文題目："Ligand-Induced Protein Responses and Mechanical Signal Propagation Described by Linear Response Theories"

著者：Lee-Wei Yang, Akio Kitao, Bang-Chieh Huang, and Nobuhiro Go

雑誌巻号：*Biophys. J.* **107**, 1415-1425 (2014).

揺動散逸定理は、熱平衡状態での分子の柔らかさと摂動を受けた際の応答、すなわち分子の機能との関係を理解するうえで鍵となる概念であり、線型応答理論はこれを具体的に説明するものである。池口らの研究では、タンパク質の平常状態の揺らぎとリガンド結合という摂動を受けたときの応答としての構造変化が、時間非依存の線型応答理論でよく説明できることが示されている[1]。この結果は、タンパク質のような複雑で大きな分子においても、機能に密接に結び付く大きな構造変化が平衡状態でのゆらぎと密接に関係していることを明らかにしたという点で重要な意味がある。一方で、この取り扱いは時間非依存であるため、摂動後の構造変化を予測する目的には役立つものの、時間に沿ってどのように構造が変化していくのかというダイナミクスを研究するためには利用しにくい。

そこで我々は時間の線型応答理論を定式化し、リガンド結合によるタンパク質応答のダイナミクスを研究することにした。この理論によって CO 結合時のミオグロビンの立体構造変化を調べることで、2 段階の緩和があることが観察できた。遅い方の緩和は、4.4 から 81.2 ピコ秒の間で起こっているが、特に2つの芳香性アミノ酸残基の緩和時間は A02 項目の水谷グループによって行われた時間分解共鳴ラマンの結果[2]や時分割 X 線結晶解析の結果と一致して

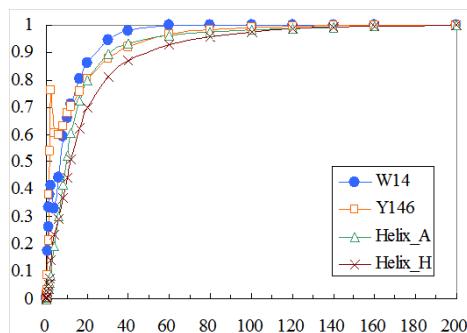


図 1. 線型応答理論で得られたアミノ酸残基とヘリックスの応答の時間変化。

いる。速い緩和は400フェムト秒程度で引き起こされていた。

また、この理論では摂動が時空間的にどのようにタンパク質に影響を及ぼしていくのかを詳しく調べることができる。ミオグロビンの中で摂動に最も早くレスポンスするいくつかのアミノ酸残基は進化的によく保存されており、これらの残基の変異はミオグロビンのキネティクスを大きく変化させていることも見いだされた。

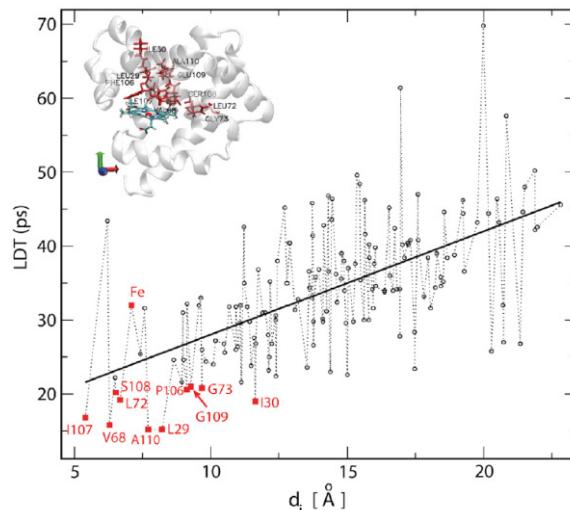


図 2. 距離の関数としての各アミノ酸残基の応答の様子。応答の速いアミノ酸残基が赤色で示してある。

この研究は、国立清华大学（台湾）の Yang 助教授が、北尾研で日本学術振興会外国人特別研究員として 2007 年から開始した研究がようやく日の目を見たものである。

引用文献

- [1] M. Ikeguchi, et al. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 078102 (2005).
- [2] A. Sato, et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **104**, 9629-9632 (2007).



業績紹介：ヘテロダイン検出キラル振動和周波発生分光

奥野 将成（筑波大・A02 公募研究連携研究者）
石橋 孝章（筑波大・A02 公募研究代表者）

論文題目：“Chirality Discriminated by Heterodyne-Detected Vibrational Sum Frequency Generation”

著 者：Masanari Okuno and Taka-aki Ishibashi
雑誌巻号：*The Journal of Physical Chemistry Letters* 5, 2874-2878 (2014).

分子のキラリティーは生体内で非常に重要な役割を果たしており、キラル分子の高感度検出・判別は分光学における大きな課題の一つである。現在キラル分子の研究に広く用いられているのは、円二色性 (CD)・振動円二色性 (VCD)・ラマン光学活性 (ROA) といった分光法であるが、これらは磁気双極子遷移および電気四重極子遷移を用いた手法であるため、信号強度が極めて小さく感度が低いという欠点がある。近年、キラル第二高調波発生 (SHG) やキラル和周波発生 (SFG) という、電気双極子遷移許容な光学過程を用いた分子キラリティー検出のための非線形分光法が開発され注目を集めている。これらは高い検出感度を持ち、これまでにキラルな薄膜や単分子膜への応用が報告されている。特に、キラル振動和周波発生 (VSFG) は分子の振動スペクトルを得ることができることから、キラル分子の絶対配置などの構造情報を得ることができる有力な手法といえる。近年、キラル VSFG を利用した界面における生体関連分子のキラリティーの研究が盛んにおこなわれている。

キラル VSFG 信号を与える二次非線形感受率 (χ_{chiral}) は、エナンチオマー同士で符号 (位相) が反転するという性質がある。しかし、従来のキラル VSFG の検出法では、 χ_{chiral} の絶対値二乗を検出するため、系にキラリティーがあることを検出できても、どちらのエナンチオマーであるかを判別するには煩雑な実験を必要とした。そこで我々は、近年開発されたヘテロダイン検出法をキラル VSFG へ応用し、 χ_{chiral} を複素量として測定することで、直接的にエナンチオマーを判別するこ

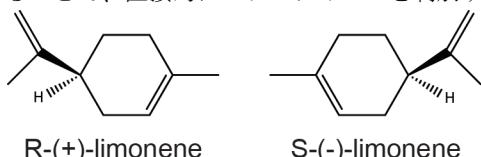


図1 リモネンの構造式

とに成功した。開発したヘテロダイン検出キラル振動和周波発生 (HD-キラル VSFG) 分光装置の評価のため、R-, S-体およびラセミ体のリモネンを測定した (図1)。図2にキラル信号を選択的に検出可能なPSP偏光配置 (左からVSFG光、可視光、赤外光の偏光を表す) で測定した複素 χ_{chiral} スペクトルを示す。

スペクトルから明らかなように、ラセミ体からはほとんど信号が検出されていないのに対し、R-, S-リモネンからは明確な振動共鳴信号が検出されている。またスペクトルの符号はR-とS-リモネンで逆転しており、エナンチオマーのキラリティーを反映していることがわかる。このように、キラル VSFG 信号をヘテロダイン検出することで χ_{chiral} スペクトルを複素量として決定し、キラリティーを決定することに成功した。また、ヘテロダイン検出法では電場の位相を観測することができるところから、キラル VSFG 信号の由来を決定することができる。本研究で測定したリモネンの反射配置における信号は、その位相 (虚部および実部スペクトルの形状) から界面由来ではなくバルク由来であると結論付けた。これは従来の方法では得ることのできなかった情報であり、HD-キラル VSFG 分光法を用いてはじめて得られた情報である。

HD-キラル VSFG 分光法は、従来法の VSFG に比べても測定感度に関して有利であり、薄膜およびバルク相の生体関連分子や時間分解測定への応用が期待される。

虚部

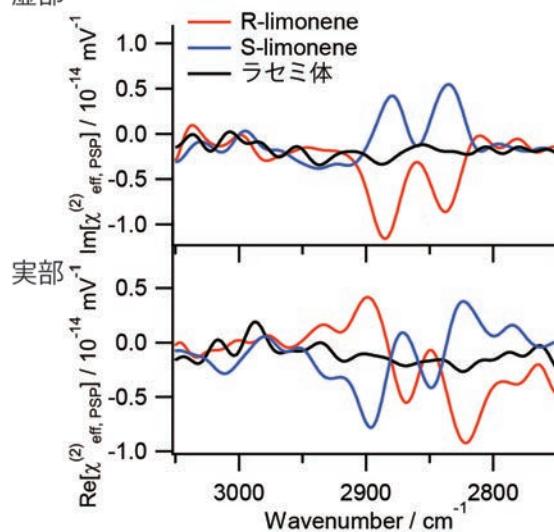


図2 χ_{chiral} の虚部(上)および実部(下)



業績紹介：1 ナノメートルの人工分子マシン 1 個を「見て、触る」： 光学顕微鏡による 1 分子モーションキャプチャ

飯野 亮太

(岡崎統合バイオ・A02 公募研究代表者)

論文題目："Motion Capture and Manipulation of Single Synthetic Molecular Rotors by Optical Microscopy"

著者：Tomohiro Ikeda, Takahiro Tsukahara, Ryota Iino, Masayuki Takeuchi, Hiroyuki Noji

雑誌巻号：*Angewandte Chemie International Edition*, **53**, 10082–10085 (2014). DOI: 10.1002/anie.201403091

直径数 100 nm の比較的大きなビーズを生体分子マシンの可動部分にとりつけ、ビーズの動きを介して生体分子マシンの運動を検出する「ビーズプローブ光学顕微鏡 1 分子運動計測法（1 分子モーションキャプチャ法）」は、1 個の生体分子マシンを「見て、触る」ことができる手法です。これまでに、生体分子モーターの運動方向や一步で進む（回る）サイズ、発生する力、エネルギー変換効率といったこの方法でしか解らない多くのことが明らかにされてきました。最近は人工分子マシンを創生する試みが数多くなされており、1 分子モーションキャプチャ法の人工分子マシンへの適用が待たれています。しかしながらこれまで、本手法の適用範囲は、大きさ 10 nm 程度の分子としては比較的大きい生体分子マシンに限られていました。

我々は今回、1 分子モーションキャプチャ法を大きさ 1 nm の人工分子マシンに拡張しました。具体的な計測対象はダブルデッカーポルフィリン（DD）です（図 1 上）。DD は、分子内の 2 枚のポルフィリンがお互いにホイールのように回転することが知られており、人工分子ベアリングとも呼ばれています。DD の 1 分子モーションキャプチャを行ったため、従来法を一から見直しました。まず、DD の固定部分と回転部分をそれぞれ 2 点以上の化学結合で基板とビーズの表面に固定する必要があります。DD は生体分子マシンより小さいため、DD が多点で反応できるように従来よりも高密度に官能基修飾した基板を開発しました。また、観察中は基板とビーズの距離が 1 nm と小さくなるため、これらの表面同士にはたらく相互作用がビーズの回転運動を妨げる可能性がありました。このため従来の水中ではなく、相互作用を弱めることができる有機溶媒中の観察手順を構築しました。こうして、DD の一

方の板をガラス基板に固定化し、もう一方の板を 200 nm のビーズに結合させ、結合したビーズの回転運動を光学顕微鏡で可視化することに成功しました。観察の結果、ビーズは 90° 間隔の一過的な停止角度を示しつつ回転拡散運動を行うことが明らかとなりました（図 1 下）。この挙動は DD 分子の構造対称性から予想されていましたが、今回の観察で初めて実証されました。さらに、磁性体でできたビーズに外から磁場を加えることで、1 個の DD の回転を強制的に操作することにも成功しました。

1 nm という大きさは、人工合成された分子も含め、マシンとしての機能を持つ分子の最小サイズです。本成果により、生体分子マシン、人工分子マシン問わず、全ての分子マシン 1 個の運動を 1 分子モーションキャプチャ法で検出、操作できることが示されました。人工分子マシンの性能を検証する有力な手法の一つとして、今後さらに発展させていきたいと考えています。

尚、本論文は *Angewandte Chemie International Edition* 誌の Hot paper に選出され、バックカバーに採用されました。共同研究者の皆様に感謝いたします。

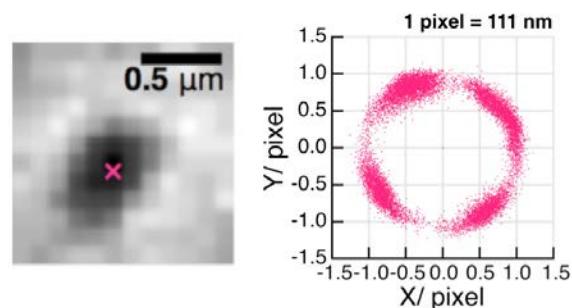
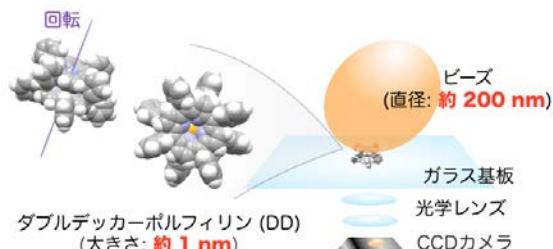


図 1：(上) 実験の模式図、(下) 観察したビーズの像とその重心の軌跡。



分子研・倉重佑輝助教が「平成 26 年度分子科学研究奨励森野基金受給者」に選ばれる

北尾 彰朗（東大分生研・A01 計画研究代表者）

本新学術領域 A01 項目の公募研究代表者である倉重佑輝さん（分子研・助教）が、平成 26 年度分子科学研究奨励森野基金の受給者に選ばれました。森野基金は、初めて「分子科学」という領域名を提案され、日本の分子科学の創成期において大きな足跡を残された故森野米三先生の寄付により始められた基金で、そのもっとも重要な活動の一つが分子科学の将来を担う有望な若手研究者への研究助成です。これは、それまでの優れた研究成果にたいして一層の発展を期待して助成が行われるというように賞としての側面が強くあり、倉重さんの対象となった研究課題は「密度行列縦込み群に基づく多参照電子状態理論の開発および生体内金属酵素反応への応用」というものです。以下に受給に結びついた研究の概要をご紹介します。

多参照問題とは、強い電子相関のもとで発現する特異な電子状態においては現在の電子論の基礎である分子軌道描像が成り立たなくなるという問題です。いまだ信頼性の高い記述法や基礎概念が十分に確立されておらず、理論化学の残された問題となっています。例としては金属錯体系や π 共役系など、特異な電子的機能が期待される分子系があげられます。従来の理論に基づく記述法では情報量が指数関数的に増大することから適用範囲が小分子など非常に限られていました。倉重さんは「密度行列縦込み群法」と呼ばれる、指數オーダーの量子情報を一連なりの行列積表現を用いて多項式オーダーへ圧縮する方法を用いて多参照問題を取り組んできました。密度行列縦込み群法とは 1990 年代初頭に物性物理領域で提案された方法で、現在も一次元の強相関電子系に対する最も強力な数値解法の一つとして広く用いられています。2000 年頃からすでに分子系への応用が検討されてきましたが、本来は一次元的な相関に対する方法の密度行列縦込み群法にはクーロン相互作用を通して all to all で電子が相関する分子系の問題をどのように一連なりの行列積表現にマップすれば良いか自明でないなど様々な障害により適用系は一次元分子系や水分子や窒素分子など小分子に限られていました。そのような状況の中、倉重さんは多参照電子系の中でも特に金属錯体系を念頭に *ab initio* 密度行列縦込み群法の開発を進め 2009 年に金属錯体系への応用を初めて実現し、¹ その後も、より

幅広い化学現象の取り扱いを可能にするために *ab initio* 密度行列縦込み群法を基盤とした新規理論の開発を展開しています。中でも行列積表現波動関数を参考関数とする多参照摂動法の開発は重要です。^{2,3} なぜなら *ab initio* 密度行列縦込み群法が考慮する強い電子相関とは別に動的電子相関と呼ばれる弱い電子相関も考慮しなければ、例えば結合距離や解離エネルギーを正しく予測できないなど化学反応・現象を扱うのに不十分だからです。また最近では、光合成酸素発生中心のマンガンクラスターの多参照電子状態を初めて明らかにするなど、⁴ 倉重さんは開発した理論を用いた金属錯体系を中心とする種々の問題への応用を精力的に進めています。多参照電子状態の背後にあるのは多数の電子状態の競合すなわち自由度の高さです。金属錯体系や π 共役分子系の電子的機能はこの自由度を上手く利用して発現するとともいえ、それは「柔らかな分子系」に通じるものです。

森野基金の歴代受給者の多くが現在の分子科学を牽引されています。倉重さんの今後のさらなる研究の発展と益々の活躍を期待しています。



贈呈式にて（前列中央右が倉重佑輝助教）

1. Y. Kurashige and T. Yanai, J Chem Phys 130, 234114 (2009).
2. Y. Kurashige and T. Yanai, J Chem Phys 135, 094104 (2011).
3. Y. Kurashige, Mol Phys 112, 1485 (2014).
4. Y. Kurashige, G.K.-L. Chan, and T. Yanai, Nature Chemistry 5, 660 (2013).



神取グループの井上圭一さんが「平成 26 年度分子科学研究奨励森野基金受給者」に選ばれる

神取 秀樹 (名工大・A03 計画研究代表者)

A03 計画研究神取グループ (名工大) 連携研究者の井上圭一さんが、平成 26 年度分子科学研究奨励森野基金の研究助成の受給者に選ばれました。本基金は故・森野米三東大名誉教授の拠出により設立され、分子科学分野で将来を嘱望される若手研究者(毎年 2~3 名程度)に対して、これまでの業績をもとに研究助成を行うもので、賞としての側面を強く持ります。今年は 8 月 29 日、東京大学・小柴ホールにおいて贈呈式が執り行われました。

今回助成の対象となった井上さんの研究題目は「先端的分光法によるロドプシンタンパク質の光誘起機能発現メカニズムの解明」です。この決定に際しては彼の大学院時代からの長年にわたる、光受容膜タンパク質であるロドプシンの分子的な動作機構解明についての研究が大きな評価を受けました。

井上さんが主たる研究対象とする微生物型のロドプシンは、光のエネルギーを使ってイオンの輸送や細胞内シグナル伝達、遺伝子発現制御などを行う膜タンパク質です。微生物型ロドプシンの研究の歴史は、最初のバクテリオロドプシンの発見以降 40 年以上にわたりますが、どのようにしてこれほどまでに多様な機能が達成されるのか、そのメカニズムについて今なお多くの不明な点が残されています。それに対して、井上さんはレーザー分光を中心とした数々の先端的な分光法を適用することで、 H^+ ポンプや Cl^- ポンプ、光センサー型など 10 種類以上のロドプシンについて反応ダイナミクスを調べ、複雑なタンパク質がどのように機能発現を行うのか明らかにしてきました[1-4]。また昨年には、世界に先駆けて光でナトリウムイオン (Na^+) を輸送するロドプシンの存在を明らかにすると同時に、輸送メカニズムについて多くの知見を報告しました[5]。プロトン化し正電荷を帯びたレチナールシップ塩基を発色団として持つロドプシンでは、これまで Na^+ を輸送する分子は存在しないと考えられてきたことから、この発見は常識を覆すものです。またナトリウムポンプなどのロドプシンは、近年世界的に注目されている神経の光操作技術、オプトジェネティクスのツールとしても高い可能性を持ちます。このような多くの研究成果と将来に対する期待から、今回の助成に至りました。

これまで本助成の対象となった研究者は、分子科学分野において正に日本を牽引する研究を世界に発信し続けており、井上さんの研究についても今後の展開が大いに期待されます。実際に本助成後も新たに海洋性細菌より発見された新規 Cl^- ポンプ型ロドプシンについて、光反応サイクルの詳細などを明らかにしています[6]。また本新学術領域ではこれまで培った知見をもとに、ロドプシンの機能操作を目指した研究を創成班の一員として意欲的に行ってています。

今回は新たな取り組みとして、贈呈式のあと第 1 回森野ディスカッションが開催されました。ここでは A02 計画班の高橋 聰氏が、名古屋大学・菱川明栄氏とともに講演を行いました。また田原太平領域代表が分子研・大島康裕氏、京都大・鈴木俊法氏とともにパネルディスカッションのコメントーターを担当され、分子科学の現在および将来について活発な議論が行われました。

井上さんの研究には自身が育った分子科学会での経験が大きな役割を果たしており、そんな彼にとって今回の受賞は意義深いものがあることでしょう。井上さんには今回の助成を励みに、ロドプシン研究においてさらなる日本の存在感を世界に示すような研究を実現してくれることを大いに期待したいと思います。



写真：贈呈式にて（東大・小柴ホール）

- [1] Inoue, K.; Sasaki, J.; Spudich, J. L.; Terazima, M. *Biophys. J.* **2007**, 92, 2028-2040.
- [2] Inoue, K.; Kubo, M.; Demura, M.; Kamo, N.; Terazima, M. *Biophys. J.* **2009**, 96, 3724-3734.
- [3] Inoue, K.; Sudo, Y.; Homma, M.; Kandori, H. *J Phys Chem B* **2011**, 115, 4500-4508.
- [4] Inoue, K.; Tsukamoto, T.; Sudo, Y. *Biochim. Biophys. Acta* **2013**, 1837, 562-577.
- [5] Inoue, K.; Ono, H.; Abe-Yoshizumi, R.; Yoshizawa, S.; Ito, H.; Kogure, K.; Kandori, H. *Nat. Commun.* **2013**, 4, 1678.
- [6] Inoue, K.; Koua, F. H.; Kato, Y.; Abe-Yoshizumi, R.; Kandori, H. *J Phys Chem B* **2014**, in press.



川村グループの北橋由貴さんが The 2nd International Conference of D-Amino Acid Researchにおいて Best Poster Award を受賞

川村 出 (横国大・A02 公募班 研究代表者)

A02 柔らかな分子系計測 公募研究 川村グループ(横浜国立大学)の研究協力者である横浜国立大学 大学院工学府の北橋由貴さん(博士課程前期 1 年)が平成 26 年 9 月 2 日(火)から 5 日(金)まで栃木県宇都宮市 総合文化センターで開催された The 2nd International Conference of D-Amino Acid Research(第 2 回 D アミノ酸国際学会、IDAR2014)において Best Poster Award を受賞されたことをご報告いたします。

D アミノ酸の基礎から応用にわたる研究は飛躍的に発展し、その中で D-アミノ酸の分析技術をはじめとしてこの分野で日本が秀でた研究実績をもち、日本の D アミノ酸学会の設立 10 年目にあたる 2014 年に国際医療福祉大学薬学部の金野柳一教授が会頭として、日本の主催で国際会議が開催されました。国内外から幅広い分野の研究者が一同に介して、非常に盛会でありました。

北橋さんの研究対象はキバラスズガエルの皮膚分泌物に存在するボンビニン H2 および H4 と呼ばれる 2 つの抗菌ペプチドです。この 2 つのペプチドのアミノ酸配列は同じですが、その違いは H4 に含まれる 1 つのアミノ酸残基が D 体に置き換わっている点のみです。この立体配置の違い(柔らかさ?)だけで抗菌活性が大きく異なることが報告されており[1]、実際にこれを再現しました。もうひとつのペプチドである H2 が全て L 体のアミノ酸で構成されていることを考えると、このことは大変な驚きです。そこで分子メカニズムに迫るために³¹P NMR 測定などを駆使して、細胞膜との相互作用を解析したデータを発表しました。このような内容が評価されて受賞となりました。今後は、細胞膜中のタンパク質の動的構造解析が可能な固体 NMR の測定技術を用いて、膜結合構造などを詳細に調べることで、D アミノ酸が関わる抗菌活性の分子メカニズムを明らかにしていく予定です。柔らかな分子系を理解することが目的の本領域においても大変興味深い研究対象である。

この賞はこの会議において優れた発表をした研究者に与えられる賞であり、54 件のポスターから 6 件選出された 1 人に北橋さんのポスターが選ばれました。北

橋さんのポスターは静岡大学 名誉教授の八木達彦先生や多くの国内外の研究者から興味をもっていただき、非常に密なディスカッションを繰り広げました。現在、修士 1 年の学生であり、今後の発展が益々期待されます。



The 2nd International Conference of D-Amino Acid Research で Best Poster Award を受賞した北橋さん。
受賞後に研究室の NMR 磁石前にて撮影。

参考文献

- [1] M. Mangoni (2013) *Curr. Protein and Peptide Science* 13 734-743.



17th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy

(NC-AFM2014) 開催報告

清水 智子 (物材機構・A02 公募研究代表者)

平成 26 年 8 月 4 日 (月) から 5 日間にわたり、つくば国際会議場にて第 17 回非接触原子間力顕微鏡法國際会議 (17th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy) が開催された。毎年開催される本国際会議は、高解像度の原子間力顕微鏡 (AFM) の装置開発やイメージング技術、それを用いて解析した物質・材料の科学を実験と理論の両面から議論する場である。今年は、物材機構の CUSTANCE Oscar 博士が開催委員長、清水がローカルオーガナイザーとして開催し、19ヶ国から 169 人が参加、うち 83 名が外国からの参加であった。

初日は、日本学術振興会 学振ナノプローブテクノロジー第 167 委員会の主催によるシンポジウムで、5 件の招待講演が行われた。安藤教授 (金沢大) による高速 AFM イメージング、Gotzmann 博士 (IBM チューリッヒ) による熱プローブ測定、Perez 教授 (マドリード自治大) による AFM 理論計算の発表では、1 時間ずつの枠を設け、基礎的な知識や背景も詳しく説明していただいた。木村准教授 (神戸大) と辯天助教 (京大) には、リチウムイオン電池と太陽電池材料の AFM 評価について、それぞれご講演いただいた。

2 日目からは、NC-AFM の最新研究について、シングルセッションで 44 件の口頭発表、89 件のポスター発表が行われた。酸化物・有機分子・半導体など多種多様な材料に対して、超高真空極低温環境下での分光計測、液中のイメージング、プローブと試料間に働く力の理論解釈などが議論された。清水が「柔らかな分

子系」で取り組んでいる高解像度イメージング手法については、共同研究者の MOERNO Cesar 博士が発表した。

ポスター発表では、40 名の学生発表者にポスター賞をかけて熱い議論を交わしてもらった。研究テーマの科学的重要性だけでなく、ポスターのビジュアルや熱意、積極性、コミュニケーション能力などを総合的に評価した。1 位となった Elliot Fuller 氏 (UC アバイン) には最優秀賞として SPECS 社から賞金が、さらに 3 名のファイナリストにも公益財団法人新世代研究所から賞金が授与された。発表した学生だけでなく、44 名の審査員も気合の入った、大盛り上がりのセッションであった。

その他に、AFM に関する企業の展示とランチョンセミナーも開催され、展示には 10 社が参加して、連日コーヒーブレークやポスター発表の時間を通じ、各ブースで賑わいを見せていた。

清水はこれまで多くの会議に参加してきたが、会議開催に関わるのは今回が初めてだった。開催期間前や開催中、さらに会議後にもこれほど多くの仕事があることに気付いていなかった。本会議終了時には、多くの方々から Congratulations! Great job! といったねぎらいの言葉をかけていただき、達成感と安堵と喜びに浸った。本会議開催に関わり支援してくださった方々に心から御礼申し上げたい。また、今後学術会議等に参加するときには、サイエンスを楽しく快適に議論する場を準備し、支えてくれる人達への感謝の念を忘れずにいたい。



参加者全員集合写真



16th International Congress on Photobiology 参加報告

加藤 善隆（名工大・A03 計画研究協力者 D2）

2014 年 9 月 7 日から 12 日まで、アルゼンチン・コルドバで行われた 16th International Congress on Photobiology (ICP) に神取秀樹教授、D1 の伊藤燐太君、M2 の吉田一帆さんと参加しました。今回の海外渡航にあたって、本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。関係者の方々にこの場をお借りして感謝申し上げます。

ICP は Vision、Plant、Circadian Clock、PDT といった光生物学分野の研究者が一堂に会する国際会議で、5 年毎に開催されています。今回は 38ヶ国から約 500 名の研究者が参加し、5 日間にわたり議論を交わしました。私は「Spectroscopic study of light-driven sodium ion pump (光駆動ナトリウムポンプの分光研究)」という題目で 2 日目の朝に口頭発表をしました。光駆動ナトリウムポンプ (NaR) はナトリウムイオンの他にプロトンもポンプしますが、プロトンポンプ機構についてはこれまで全く情報がありませんでした。そこで、本研究では NaR の光反応について pH 依存性や重水素置換による影響を調べ、NaR の持つプロトンポンプの機構についてモデルを提示しました。私が発表をした Microbial Rhodopsins のシンポジウムは講演者 6 名から成り、前から 4 名が著名なロドプシン研究者（招待講演）、その後 2 人が PhD の学生という構成でした。このシンポジウムには他にも有名な研究者が集まっており、質疑中はあちらこちらから意見が出ていました。今回の学会の中で最も白熱した議論を交わしていたように思います。最後の講演者であった私は、そのような雰囲気の中で少し緊張てしまい、予定よりも早く発表を終えました。それでも内容には興味を持って頂けたようで、セッション終了後にも数人の方から質問やコメントを頂きました。

今回の会議では、神取先生に加えて水谷泰久先生も招待講演をされました。お二人が講演した Spectroscopic Methods のシンポジウムは席がほぼ埋まるほどの盛況ぶりで、理論の研究者も加わりながら深い議論が繰り広げられました。また、神取先生は色覚視物質の赤外分光研究について Keynote Lecture も行い、多数の聴衆を大いに沸かせるなど存在感を示しておられました。今回、光生物の分野において日本の先輩方がどれだけ認められているかを確認することができ、

我々若手研究者もモチベーションが高まりました。

4 日目には前の晩にオーガナイザーの Rosalie Crouch 先生と食事をご一緒にすることもあり、Visual Rhodopsins のシンポジウムに参加しました。ここでは視細胞でのシグナル伝達や細胞の形態制御などが対象であり、分子科学の研究をする私とは遠い内容でしたが、興味深い発表が多く質問も 1 つすることができました。国内でも視点を広げる目的で多様なセッションに参加するように心掛けているが、国際学会において質疑に参加できたことは大きな収穫でした。

今回の渡航にあたって、領域代表の田原先生から研究室訪問を推奨されたため、学会主催者の先生に依頼してコルドバ大学で気相分光の研究をされている Gustavo Pino 先生の研究室を（セッションのなかつた学会 3 日目の午後に）訪問することになりました。Pino 先生は神取先生も全くご存じない研究者でしたが、実は藤井正明先生と共に著の論文を出していらっしゃることが判明し、地球の裏側まで本領域の影響が及んでいることに驚きました。気相分光は論文や会議の発表では馴染みはあったものの、実際に装置を見るのは初めてであり、原理や測定方法など基本的なところから説明して頂きました。経済の不安定なアルゼンチン（入国時 1 ドル 8.7 ペソだったのが、この日両替したら 1 ドル 12 ペソでした）ならではの装置購入時の苦労話も話してください、貴重な経験になりました。

今回の海外渡航では多くの方と接する機会がありアドバイスも頂きました。これらを今後の研究に活かせるよう、より一層研究に打ち込みたいと思います。



左から、Pino 先生、伊藤君、加藤、吉田さん



Ghent University での共同研究および研究室訪問報告

南 翰輔 (物材機構・A03 公募研究協力者)

本新学術領域研究の若手研究者海外派遣の支援を受けまして、2014年9月18日から24日にかけてベルギー王国ヘント市のゲント大学（蘭: Universiteit Gent）を訪れ、Bruno De Geest 教授の研究室訪問および共同研究ディスカッションを行う機会を頂いたので本稿にて報告する。

今回の訪問先の De Geest 教授は、Department of Pharmaceutics に属し、ドラッグデリバリーシステムの輸送担体開発からその生物アッセイまで幅広く研究をなされている。中でも、世界的に広く研究が勧められているがん標的型デリバリーシステムのみならず、ワクチン輸送にも注力されている。私は、以前従事していたフラーレン誘導体を用いたドラッグデリバリーシステム、現在従事している再生医療を目指した組織工学研究について議論した。また、近年 De Geest 教授が進めているワクチン輸送について、輸送担体のナノスケールの構造制御により、異なる機能を誘起できることを議論した。この一連の研究議論の中で、私の所属する物材機構の国際ナノアーキテクニクス研究拠点の得意とするナノ構造体の構築を基礎とした3つの新たな研究シードを立ち上げるに至った。

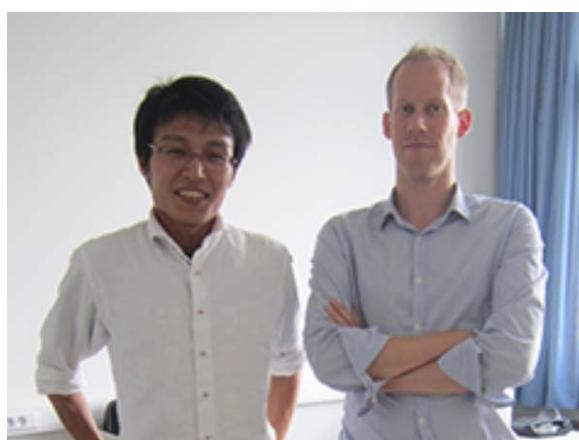
また、De Geest 教授の研究室内も見学させていただいた。De Geest 教授のグループは、学生およびポスドク研究員を含め 10 人程度の小さなものであるが、薬学研究を行う上で必要な有機合成室、粒径測定などの評価室、培養細胞などを用いる滅菌室に加え、錠剤調製および評価を行う実験室と非常に充実していた。このような研究環境にて非常に活発な研究が進められ、多くの論文発表に繋がっているのだと実感させられた。一方で、期間中、De Geest 教授と昼食をご一緒させていただいた。そちらでは、研究ではないベルギーと日本との文化の違いなど様々な会話を楽しんだ。天候や食文化、大学制度や学生・研究員の過ごし方など多くを話し、様々な違いを感じることができた。

ベルギーは、ゲルマン系のフラン的语言（オランダ語）圏とラテン系のフランス語圏との両者が公用語として用いられており、文化圏の境界であるため、EU や NATO の本部が置かれている国である。そのため、道路標識にはオランダ語・フランス語に加え英語が入り交じっているなど、折に触れてその多様さを目の当た

りにすることができた。このような多様な文化に触れる中、本旅程中の週末に同国ルーヴェン市にあるルーヴェン・カトリック大学（蘭: Katholieke Universiteit Leuven）を訪れる機会もあった。こちらの大学は、創立は 1425 年と非常に古く、以前はオランダ語話者とフランス語話者の両者が教鞭を取っていたため、両語圏の学生が授業を受けることが可能であった。しかし、1968 年にフランス語話者が分離したという特異な歴史を有している。分離したフランス語話者の通う旧ルーヴェン大学は、ルーヴェン・ラ・ヌーボとして別の大学となっている。現在のルーヴェン大学では、ヨーロッパ各地から学生が集う国際的な大学となっており、英語で開講されている授業もあると聞いた。

今回の研究室訪問では、3 つの新たな研究シードを見いだすのみならず、日本とベルギーの文化の違いを研究面や生活面で経験し、様々なことを考え、学ぶことができました。このような機会は、海外に実際にやってみることで感じられるものであり、国際化の進む研究分野に従事する上で非常に有意義な経験を得ることができた。今後は立ち上げた研究シードを発展させるとともに、国際的な共同研究を進めていきたいと思います。

最後に、本研究室訪問にあたって旅費を支援していただいた本新学術領域研究に深く感謝申し上げます。



De Geest 教授と教授室にて。(左、著者；右、De Geest 教授)



A02 班・川村グループの研究論文が 海外サイトに Journal Highlight として紹介される。

A02 班・公募研究 川村グループらの研究論文 (H. Yomoda et al. (2014) *Angew. Chem. Int. Ed.*) が 2014 年 8 月 4 日に世界の分光学情報を掲載する spectroscopyNOW.com (Wiley) に Journal Highlight

として紹介されました。これは *In-situ* 光照射-固体 NMR 法を用いた正および負の走光性機能をもつセンサリードプシン I のレチナールの構造と光反応を明らかにした研究成果です。

The screenshot shows the homepage of spectroscopyNOW.com, specifically the 'NMR Knowledge Base' section. The main navigation bar includes links for Home, Atomic, IR, MRI, MS, NMR, Raman, UV, X-Ray, Chemometrics & Informatics, and Proteomics. Below the navigation bar, there are links for Ezine, News, Webinars, Books, Education, Events, Videos, Journals, and Blog. The central content area features an image of a human eye and the title of the highlighted paper: "Journal Highlight: Color-discriminating retinal configurations of sensory rhodopsin I by photo-irradiation solid-state NMR spectroscopy". Below the title, it says "Published: Aug 4, 2014" and "Author: spectroscopyNOW". A sidebar on the right shows a close-up image of a person's eye.

Ezine
Journal Highlight: Color-discriminating retinal configurations of sensory rhodopsin I by photo-irradiation solid-state NMR spectroscopy
Published: Aug 4, 2014
Author: spectroscopyNOW
Channels: NMR Knowledge Base

Color-discriminating retinal configurations of sensory rhodopsin I by photo-irradiation solid-state NMR spectroscopy
Angewandte Chemie International Edition, 2014, 53, 6960-6964
Hiroki Yomoda, Yoshiteru Makino, Yuya Tomonaga, Tetsuro Hidaka, Izuru Kawamura, Takashi Okitsu, Akimori Wada, Yuki Sudo and Akira Naito

Abstract: SRI (sensory rhodopsin I) can discriminate multiple colors for the attractant and repellent phototaxis. Studies aimed at revealing the color-dependent mechanism show that SRI is a challenging system not only in photobiology but also in photochemistry. During the photoreaction of SRI, an M-intermediate (attractant) transforms into a P-intermediate (repellent) by absorbing blue light. Consequently, SRI then cycles back to the G-state. The photoreactions were monitored with the ^{13}C NMR signals of [20- ^{13}C]retinal-SrSRI using *in situ* photo-irradiation solid-state NMR spectroscopy. The M-intermediate was trapped at $\sim 40^\circ\text{C}$ by illumination at 520 nm. It was transformed into the P-intermediate by subsequent illumination at 365 nm. These results reveal that the G-state could be directly transformed to the P-intermediate by illumination at 365 nm. Thus, the stationary trapped M- and P-intermediates are responsible for positive and negative phototaxis, respectively.

- This paper is free to view for all users registered on spectroscopyNOW.com until the end of September 2014.
After this time, you can purchase it using Pay-Per-View on Wiley Online Library.
- Click here to access the abstract of this paper >>>
From the abstract page you can progress to read the full paper.
- Click here for more information about *Angewandte Chemie International Edition* >>>