



第5回ワークショップ 開催報告

林 重彦（京大院理・A01 計画研究代表者）

去る 2014 年 9 月 20 日に「柔らかな分子系」領域の第 5 回ワークショップが、広島平和公園に程近いアステールプラザにて開催されました。本ワークショップは、若手の研究者が中心となって行う「若手ワークショップ」の一環であり、そのくくりで言うと、同年 3 月 26 日に行われたワークショップから二回目の開催となります。今回は、A01 班の倉重佑輝氏（分子研）、A02 班の水野操氏（大阪大）、及び A03 班の楊井伸浩氏（九州大）の三人の若手研究者が中心となり企画・運営がなされました（似非若手の林はお手伝い）。

今回のワークショップでは、若手研究者のワークショップというコンセプトだけではなく、内容に明確なテーマが設定されました。それは、上記若手世話人が熟議の上決定したタイトル「柔よく光（こう）を制す（柔らかな分子系の光機能）」に良く表されています。光エネルギー変換や光操作などに関わる重要な研究テーマとなっている光分子機能において、分子の柔らかさはどのような役割を果たすのか—それがテーマです。

本ワークショップでは、大きく分けて創成（A03）・計測（A02）・理論（A01）の三分野に関して、領域外からお招きしたそれぞれ 1 名の研究者、及び領域内から大学院生を含む若手研究者の講演が行われました。まず、創成に関するセッションが行われ、最初に楊井氏が三重項励起移動によるアップコンバージョン発光現象に関する講演を行いました。励起子分子の配向や距離を制御し非常に高効率な発光を可能にする金属錯体骨格系や、「柔らかい」液晶や無溶媒液体系における発光現象についての報告がありました。次に伊藤栄太氏（名工大、大学院生）が、チャネルロドプシン（ChR）における光誘起構造変化の伝播仮定に関する講演を行いました。細胞光操作技術で用いられる光感受性チャネルタンパク質である ChR に対して FTIR 測定を行い、機能に重要となる構造変化の観測を報告しました。次に、萩原啓太氏（東工大、大学院生）による複数のアントラゼン環を有する分子チューブに関する講演が行われました。少數のアントラゼンを含む小径の分子チューブを合成と、その蛍光分子の内包、更には蛍光分子に選択的な内包によるエキシマー形成が報告されました。創成セッションの最後には、領域外からお招きした高木慎介氏（首都大）の招待講演が行われまし

た。粘土鉱物をホスト材料とした二次元の色素ナノレベル集合構造制御と、それを用いた人工光捕集系についてのこれまでの研究に関する講演をして頂きました。

次に、計測のセッションに進み、まず水野氏による紫外共鳴ラマン分光を用いた高速タンパク質ダイナミクス計測に関する講演が行われました。タンパク質中の芳香族アミノ酸等の分子振動に対するピコ秒時間分解分光測定による、光受容体タンパク質の構造変化や振動エネルギー移動の時空間計測に関する報告がありました。次に、野嶋優妃氏（学習院大、大学院生）による、ピコ秒時間分解ラマン分光法を用いたリポソーム脂質二重膜のエネルギー移動に関する講演が行われました。膜中のスチルベン分子の光反応後の冷却過程の観測による、液晶相やゲル相をとる様々な脂質二重膜の熱拡散定数の測定に関する報告がありました。次に、領域外からお招きした木村哲就氏（理研）の招待講演が行われました。マイクロ流路を用いたフローフラッシュ測定による、試料消費抑制が可能である繰り返し計測系の構築と、それを用いた一酸化窒素還元酵素の反応分子機構解析に関する講演をして頂きました。

最後のセッションでは、理論に関する講演がありました。まず、倉重氏が有機結晶によるマルチエキシジョン生成機構に関する講演を行いました。大きな分子の多電子励起状態にも適用が可能な密度くりこみ群法を用いたオリゴアセン分子の一重項分裂の分子機構に関する研究の報告がありました。次に、内田芳裕氏（京都大、大学院生）の緑色蛍光タンパク質（GFP）の蛍光スペクトルに関する研究の講演が行われました。タンパク質の揺らぎを考慮することが出来る QM/MM 自由エネルギー法を用いた GFP 分子の吸収・蛍光スペクトル形状の理論的解析が報告されました。最後に、領域外からお招きした藤本和宏氏（神戸大）の招待講演が行われました。分子性結晶中の光物性に対する、励起状態間の電子的相互作用を計算する独自手法の開発とその応用、特に電荷分離状態を経由する励起エネルギー移動の重要性に関する講演をして頂きました。

質疑応答では、若手研究者や大学院生からの活発な質問・及び議論が行われました。「若手」シンポジウムという括りは、ある意味、年齢差別と捉えることも出来ますが、若手が元気であることが、新しい発想を生み出し科学を発展させることに必要です。是非、この枠組を積極的に活用して頂ければと思います。



生物物理学会年会共催シンポジウム 開催報告

北尾 彰朗 (東大分生研・A01 計画研究代表者)
水谷 泰久 (阪大院理・A02 計画研究代表者)

平成 26 年 9 月 25 日 (木)、札幌コンベンションセンターにおいて、第 52 回日本生物物理学会年会シンポジウム「柔らかさが制御する生体分子系の構造形成と機能 Regulating structure formation and function of biomolecular systems with softness」を「柔らかな分子系」との共催という形で行いました。共催の形で生物物理学会年会のシンポジウムを行うのは今年が第一回目なので、計画研究のバイオ関係の代表者の中からスピーカーを選び、講演順に北尾彰朗(東大分生研、A01)、高橋聰氏(東北大多元研、A02)、神取秀樹氏(名工大、A03)、林重彦氏(京大院理、A01)、水谷泰久(阪大院理、A02)が発表をおこないました。オーガナイザーは北尾と水谷でした。最近の年会は英語で発表することになっており、このシンポジウムでも発表はすべて英語でおこなわれました。

シンポジウムは年会初日の朝一番の時間帯に行われました。平成 26 年度は既に 4 月に公募研究者の方々も加わってのフルメンバーでの研究体制が確立していることも加わって、シンポジウムにどれだけ参加していただけるか不安もありましたが、杞憂に終わりました。300 名ほど入るホールにも関わらず立見の出るほどたくさんの方々に参加していただきました。

最初に、北尾がこの領域の全体の説明も含めて発表をおこないました。異方性の高いタンパク質の揺らぎ・構造変化と機能の関係、更にそれを分子シミュレーションで観察するための最新の計算法について講演しました。

二番目の講演者の高橋氏は、20 マイクロ秒の時間解像度で 1 分子 FRET を観測する方法を開発し、これを用いた protein A の B ドメイン (BdpA) とユビキチンのフォールディングに関する最新の結果を発表しました。このような高時間解像度の観測は、他の計測・理論との協奏によってタンパク質フォールディングのより詳しい理解へと展開していくものと期待されます。

神取氏は、光応答性タンパク質の機能転換について講演しました。講演で発表されたフラボタンパク質やロドプシン類の非可逆的機能転換の研究成果は、今後の様々な分子デザインに重要な知見をあたえるものと考えられます。

四番目に林氏が量子化学計算と分子動力学計算の長所を巧みに組み合わせたアプローチで、酵素反応におけるタンパク質の柔らかさ・ダイナミクスの重要性を明らかにした成果を発表しました。Ras-GAP GTPase 等の結果からは酵素反応にダイナミクスの影響を考慮する重要性が明確に示されました。

最後に水谷が、時間分解共鳴ラマン分光法によって観察したピコ秒からサブ秒までの広い時空間でタンパク質のダイナミクスについて発表しました。このようなサイト選択的方法は、タンパク質ダイナミクスを詳細に解析するために重要であり、この領域での共同研究によってより統合的な描像が得られることを予見するものでした。

プログラム

- 9:45 Observing soft functional motion of proteins
in silico
Akio Kitao (IMCB, Univ. Tokyo)
- 10:15 Continuous tracking of protein folding at microsecond resolution by a line confocal detection of single molecule fluorescence
Satoshi Takahashi (IMRAM, Tohoku Univ.)
- 10:45 “Soft” structure-function relationship revealed by functional conversion of photoreceptive proteins
Hideki Kandori (Nagoya Inst. Tech.)
- 11:15 Crucial Role of Protein Flexibility in Enzymatic Catalysis
Shigehiko Hayashi (Grad. Sch. Sci., Kyoto Univ.)
- 11:45 Time-resolved Observation of Functionally-important Molecular Flexibility of Proteins
Yasuhisa Mizutani (Grad. Sch. Sci., Osaka Univ.)

シンポジウムは単に最新の研究が紹介されただけでなく、参加者との活発な議論がおこなわれ、大変盛況でした。なお、第 53 回日本生物物理学会年会でもシンポジウムの共催が計画されています。公募研究者を含めたこの分野の研究者が、研究の進展を発表していただける良い機会になると期待しています。



業績紹介：リン脂質による TRPV4 イオンチャネルの制御

北尾 彰朗 (東大分生研・A01 計画研究代表者)
竹村 和浩 (東大分生研・研究員)

論文題目：“TRPV4 channel activity is modulated by direct interaction of the ankyrin domain to PI(4,5)P₂”

著者：Nobuaki Takahashi, Sayaka Hamada-Nakahara, Yuzuru Itoh, Kazuhiro Takemura, Atsushi Shimada, Yoshifumi Ueda, Manabu Kitamata, Rei Matsuoka, Kyoko Hanawa-Seutsugu, Yosuke Senju, Masayuki X. Mori, Shigeki Kiyonaka, Daisuke Kohda, Akio Kitao, Yasuo Mori and Shiro Suetsugu

雑誌巻号：*Nat. Commun.* 5, 4994 (2014).

本論文は、奈良先端科学技術大学院大学の末次志郎教授らを中心とした共同研究で、TRPV4 と呼ばれるイオンチャネルを対象としている。TRPV4 は温度や機械刺激の認識に重要であることが知られており、その変異は、筋肉萎縮症や構音障害や呼吸筋麻痺を特徴とするシャルコーマリートウース(CMT)病への関連が指摘されている。本論文では、これまでに明らかにされていない TRPV4 のリン脂質による制御を、タンパク質立体構造解析や分子動力学、生化学的方法、生理学的方法を組み合わせて解析を行っている。

TRPV4 のアンキリントリピートドメイン (ARD) と脂質膜の結合を調べたところ、PI(4,5)P₂ に比較的強く結合することが分かり、PI(4,5)P₂ の頭部である IP3 と ARD の共結晶を用いた X 線結晶解析および分子動力学計算をもとに、IP3 (PI(4,5)P₂) 結合サイトの候補を同定した。これら結合部位に変異を導入するとチャネル活性が増大することが分かり、PI(4,5)P₂ と ARD との結合がチャネル制御に関わることが明らかになった。また、興味深いことに、病気に関わる TRPV4 の変異も PI(4,5)P₂ への結合能が低下していることが分かり、PI(4,5)P₂ と ARD との結合によるチャネル制御の重要性が示唆された。以上の結果は、TRPV4 を標的とした創薬研究を含む様々な研究に役立つと考えられる。北尾グループは、IP3 と ARD の複合体構造予測計算、ARD へ変異が与える影響に関する分子動力学計算、TRPV4 のファミリーである TRPV1 四量体と脂質膜の相互作用に関する分子動力学計算を行った。

IP3 と ARD の複合体構造予測計算では、1 位にランクした IP3 の結合位置が X 線結晶解析より得られた結

合位置を支持する結果を得ると併に、ARD と脂質膜の相互作用モデルを分子動力学計算により構築し（図 1a）、脂質膜に安定に結合することを示した。また、複合体構造予測計算で、2 位にランクした IP3 の結合位置を基準にしたモデル（図 1b）も脂質膜と安定に結合し得ることを分子動力学計算により示し、ARD と脂質膜の相互作用に関する多様性を示唆する結果を得た。

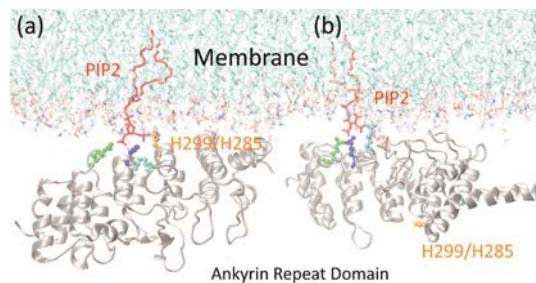


図 1 (a)X 線結晶解析と(b)複合体構造予測で 2 位にランクした構造を基に作成した ARD と脂質膜の相互作用モデル

TRPV4 と同ファミリーに属する TRPV1 に関しては、電子顕微鏡像を元に、膜貫通領域を含む四量体モデルが提唱されている。四量体モデルでは、ARD と脂質膜の距離が離れており、本論文で提唱しているような ARD と PI(4,5)P₂ の相互作用は難しいと考えられることが問題であった。我々は、TRPV1 四量体の分子動力学計算を行い、TRPV1 と脂質膜はある程度の柔軟性を有し、ARD は脂質膜中の PI(4,5)P₂ と十分に相互作用し得ることを示した（図 2）。

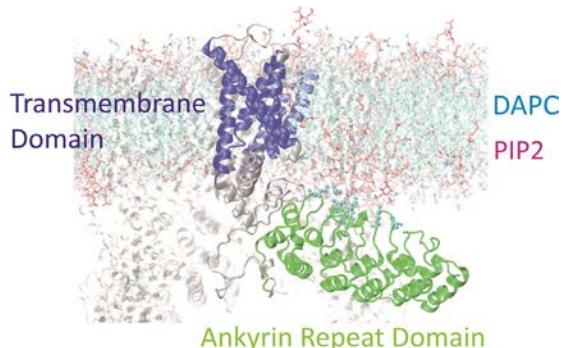


図 2 分子動力学計算より得られた TRPV1 四量体と脂質膜のスナップショット



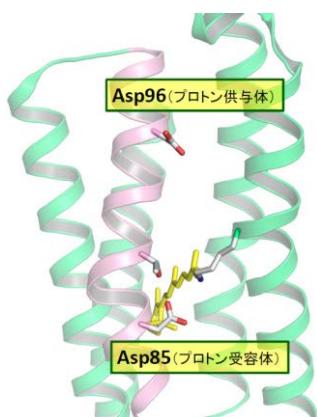
業績紹介：ロドプシン内でプロトン受容体としてはたらくヒスチジンの存在 “carboxylate rule”に従わない例の実験的証明

神取 秀樹 (名工大・A03 計画研究代表者)

論文題目：“His166 is the Schiff base proton acceptor in attractant phototaxis receptor sensory rhodopsin I”

著者：Jun Sasaki, Hazuki Takahashi, Yuji Furutani, Oleg A. Sineshchekov, John L. Spudich, and Hideki Kandori
雑誌巻号：*Biochemistry* **53**, 5923-5929 (2014).

タンパク質の機能発現にプロトン移動が重要な役割を演じている例は多いが、このとき結合基として活躍するのが Asp, Glu といったカルボン酸である。Ser, Thr, Tyr など O-H 基をもつアミノ酸や Arg, Lys, His, Gln, Asn などはプロトンの輸送経路を構成できるが、機能発現における過渡的な中間状態でプロトンを結合・解離するためには、中性付近で pKa を大きく変化させる必要がある。金属イオンの助けを借りずにこれを実現できるアミノ酸は限られており、環境によってその pKa を大きく変化させるカルボン酸は理想的なプロトン結合基である。例えばバクテリオロドプシン (BR)



内部に存在する Asp85 と Asp96 の pKa はそれぞれ 2.2 と 11.4 である [1]。水溶液中の pKa (4 度) に対して、Asp85 は正電荷をもったレチナールのプロトン化シップ塩基 (SB) と相互作用することで pKa を下げる一方、Asp96 は疎水的な部位に存在することで

プロトン化した中性状態を保っている。それぞれの pKa の値はレチナールが光を吸収して異性化すると段階的に変化する。まず Asp85 が SB のプロトンを受容する一方、膜の反対側から Asp96 が SB にプロトンを供与することで、BR の一方向輸送が実現する。レチナールと結合した Lys の SB 以外には、微生物型ロドプシンも動物型ロドプシンもプロトン供与体・受容体としてすべてカルボン酸を利用することから、Balashov らはこれを “carboxylate rule” と呼んでいる。そして Asp96 の位置に Lys を

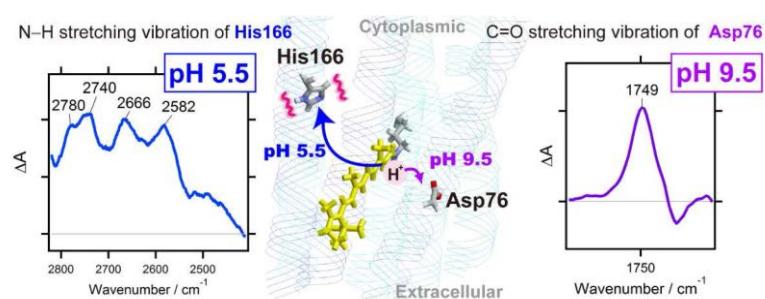
もつ新規プロトンポンプにおいて、SB のプロトン化とプロトン取込みが時間的にずれることから「カルボン酸ルール」の破綻例と報告している [2]。しかしながら、Lys が実際にプロトン化状態を変化させている実験的な証拠は得られていない。

今回、我々は走光性センサーであるセンサリーロドプシン I (SRI)において His がプロトンの受容体としてはたらくことを赤外分光を用いて証明した。SRI は伝達タンパク質と複合体を形成することで光依存的に情報変換を行う。BR の Asp85 の位置には同じく Asp76 が存在するが、その pKa は複合体を形成することで 7.2 から 8.5 まで上昇する。従って、複合体を形成した SRI において Asp76 は中性付近でプロトン化しているため、SB のプロトンを受け取れない。この状態で光を照射するとレチナール SB は脱プロトン化するが、そのプロトン受容体は未解明であった。

我々は複合体の SRI に pH 9.5 で光照射したところ、SB の脱プロトン化に伴い Asp76 のプロトン化に由来する信号 (1749 cm^{-1}) を観測した。一方、pH 5.5 で光照射したところ、SB の脱プロトン化に伴いカルボン酸の領域には正の信号は得られなかったが、通常は信号の現れない $2800\text{-}2400 \text{ cm}^{-1}$ に正の信号を観測した。同位体標識実験の結果、His の N-H 伸縮と帰属し (フェルミ共鳴により複数バンド)、変異体を用いて His166 に由来することを明らかにした。そして水溶液中のイミダゾールとの比較から、プロトン化して正電荷を持ち強い水素結合を形成した His166 であると結論した。His166 は BR の Asp96 の位置に存在し、SRI が機能する際に、BR とは逆向きのプロトン移動が起こることが明らかになった。これが伝達タンパク質の構造変化をもたらすものと考えられる。

[1] 神取秀樹、日本物理学会誌 **56**, 75 (2001).

[2] S. Balashov et al. *J. Biol. Chem.* **288**, 21254 (2013).





業績紹介：剛直な分子チューブによる柔軟な“ひも状”生体分子の識別

矢崎 晃平（東工大資源研・大学院生）
吉沢 道人（東工大資源研・A03 分担研究者）

論文題目："A Polyaromatic Molecular Tube That Binds Long Hydrocarbons with High Selectivity"

著者 : Kohei Yazaki, Yoshihisa Sei, Munetaka Akita, and Michito Yoshizawa*

雜誌卷號：*Nature Communications* 2014, 5, 5179.

生体内には、長鎖の炭化水素部位を含む“ひも状”分子が数多く存在し、構造や機能の面で重要な役割を担っている（図 1a）。しかしながら、これらは柔軟かつ分子間相互作用が弱いため、既存のホスト化合物では、それらの構造の違いを識別することが出来なかつた。我々は既に、2 つのアントラセン環を有するビスピリジン配位子[1]をメチレン鎖で架橋することにより、水溶性のボウル状分子を報告している（図 1b）[2]。この半球状ナノ空間には、芳香族分子が内包された。この知見を活かして本研究では、アントラセン環を利用した剛直なチューブ状分子の合成し、柔軟なひも状分子の高選択性的捕捉を達成した（図 1c）。

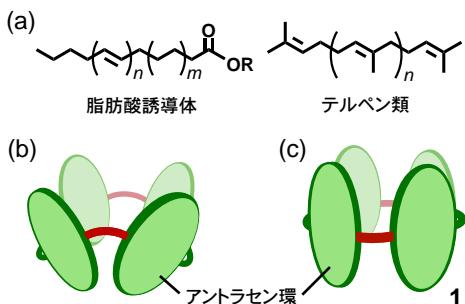


図1. (a)長鎖炭化水素部位を含むひも状の生体分子. (b)ポウル状分子および(c)チューブ状分子**1**の模式図.

分子チューブ**1**は、ビスピリジン配位子から、金属触媒を必要としないZincke反応を利用して合成した。その構造は、各種NMR、ESI-TOF MSおよびX線結晶構造解析により決定した(図2a)。結晶構造解析の結果、チューブ**1**は、4つのアントラセン環に囲まれた直径約1 nmの筒状空間を有することが明らかになった(図2b)。また、この分子チューブは、骨格内に2つのイオン性部位を持つため、水系溶媒に可溶であった。

分子チューブ**1**は剛直な疎水性のナノ空間を利用して、種々のひも状分子の構造の差異（分岐や不飽和結合）を認識して、選択的に内包した（図3a）。例えば、

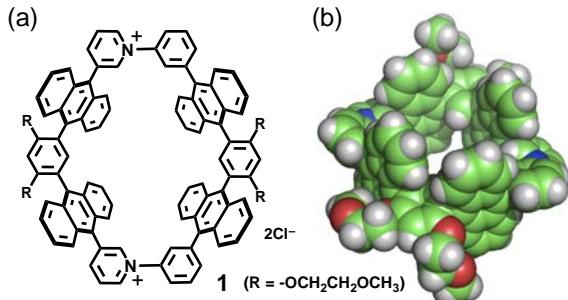


図2. (a)分子チューブ1の構造式および(b)結晶構造.

チューブ 1 の水系溶液中に、ヘプタメチルノナン 2a と同じ鎖長のノナン 2b、または、2a と同じ炭素数のヘキサデカン 2c を同時に加えたところ、チューブは多分岐のメチル基を持つ 2a のみを内包した（選択性 98% 以上；図 3b, c）。また、不飽和および飽和の脂肪酸エステル 3a と 3b（図 3b）の競争実験では、チューブは 1 つの不飽和 2 重結合を有する 3a のみを内包した。さらに、複数の分岐メチル基を有する長鎖の生体分子で、不飽和結合を含むスクアレン（4a）と飽和のスクアラン（4b；図 3b）では、分子構造が近似しているにも拘らず、4a のみを内包した。

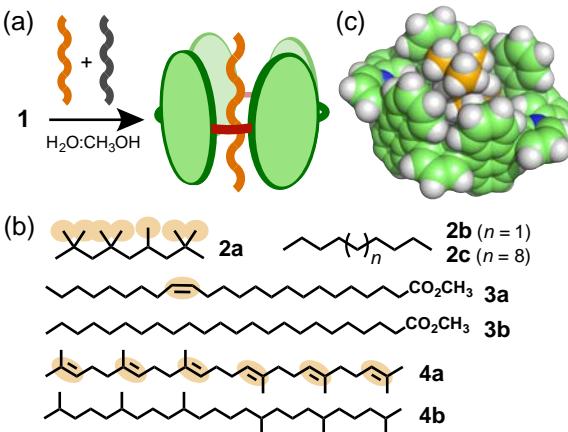


図3.(a)分子チューブ1によるひも状分子の選択的捕捉.(b)ひも状分子2a-c, 3a-bおよび4a-bの化学構造.(c)2aを内包した分子チューブ1の構造.

以上のように剛直な分子チューブは、柔軟なひも状分子に対して、効果的な疎水性/ $\pi-\pi$ /CH- π 相互作用により、その分岐メチル基および不飽和2重結合を認識し、高選択性的分子捕捉能を発現した。

参考文献 : [1] N. Kishi, M. Yoshizawa, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 11438-11441 (2011) ; [2] K. Yazaki, M. Yoshizawa, *et al.*, *Chem. Commun.* **49**, 1630-1632 (2013).



16th International Conference on Retinal Proteins 参加報告

神取 秀樹 (名工大院工・総括班)

16th International Conference on Retinal Proteins (ICRP2014) が 2014 年 10 月 5 日から 10 日まで、琵琶湖畔の長浜ロイヤルホテルで開催されました。本会議は、レチナール分子を発色団とする動物型および微生物型ロドプシンの研究者が一堂に会する分野で最も重要な国際会議です。

視物質ロドプシンによく似たタンパク質が細菌からも見つかったというバクテリオロドプシンの発見(1971 年)から 10 年ほどが経過した 1984 年、ドイツで第 1 回が開催されて以来、本会議は 2 年ごとに開催されています。一貫してロドプシンのメカニズムが中心的な話題であり、一會場でじっくりと議論する方針で行ってきました(同時にポスターセッションも行う)。ロドプシン分野の発展には日本人研究者が大きな貢献をしてきましたが、それを裏付けるように日本はすでに 3 回の ICRP を開催しており、今回、米国やドイツを上回る 4 回目の開催となりました。

この 30 年間の前半では立体構造の情報がなかったため、ロドプシンの光反応を基にしたメカニズムの議論が中心でした。一方、この 15 年では光反応中間体も含む立体構造の決定がホットなトピックスであり、X 線結晶構造解析によってすべてが解明されるという幻想に支配された時代と言えるかもしれません。しかしながら今や構造決定はメカニズム解明のゴールではなくスタートであることが共通認識となり、研究は新たな段階に入った感があります。最近のトピックスとしては、光遺伝学 (Optogenetics) が挙げられます。チャネルロドプシンをツールとして始まった光遺伝学は、今や脳機能解明だけでなく生命科学の未来を切り拓く

新しい科学技術として大きな期待を集めています。

七田芳則京大教授を実行委員長とする今回の会議には 160 名ほどの参加者があり、このうち 4 割が外国からの参加者でした。本領域の研究者も、A01 から林 重彦氏、櫻井 実氏、A02 から田原太平氏、水谷泰久氏、内橋貴之氏、川村 出氏、水野 操氏、A03 から神取、須藤雄気氏、井上圭一氏、岩田達也氏が、組織委員や実行委員、発表者として名を連ねました。14 のセッションから構成された本会議において、第 1 セッションは理論計算(林氏が招待講演)、第 2 セッションは先端計測(田原氏と内橋氏が招待講演、水谷氏は別のセッションで招待講演)、第 12 セッションは新規ツール開発(須藤氏が招待講演、井上氏と私は別のセッションで招待講演)と、本領域が掲げる三つ巴の内容を含んでいました。本領域におけるロドプシン研究の重要性を改めて実感すると同時に、ロドプシン研究における「柔らかな分子系」の視点の大切さを痛感しました。

運営に携わった立場として、さまざまなエピソードが思い出されますが、最後にうちの学生から聞いた話を記します。会議中、20 時半からのポスターセッションより継続する議論のため、23 時から畠の部屋を毎晩、準備していましたが、ある晩、日本人と外国人(若手だけでなく PI も含む)が盛り上がった挙げ句、長浜市内のカラオケに出かけたそうです。神取研の学生も一緒に行ったのですが、彼らが驚いたのは、朝まで唄っていたドイツ人やイタリア人が、翌朝のセッションには何事もなかったように出席していたことです。『生き残る研究者はタフである』というの私が常々、思っていることですが、教育的な見地からみても院生にそれを実感させるよい機会となりました。





富山大学工学部「夢大学 in 工学部 2014」にて、

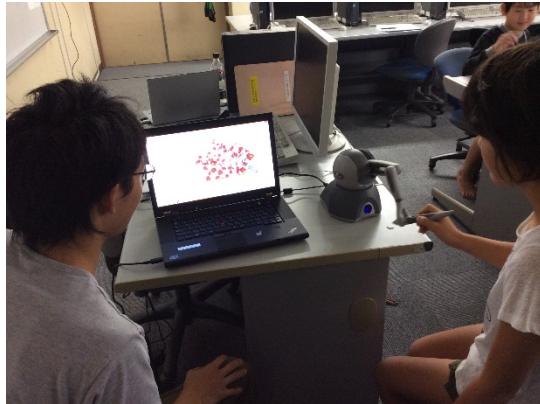
柔らかな分子系共催のアウトリーチ活動を行いました

石山 達也 (A01 班 研究分担者)

富山大学では、7 月下旬に行われる高校生を対象としたオープンキャンパスの他に、一般市民、あるいは小学生、中学生、高校生など幅広い年齢層を対象としたオープンキャンパスが催されます。理学部では「理学部サイエンスフェスティバル」、工学部では「夢大学 in 工学部」の名称で、理工ジョイントフェスタという形で 9 月 28 日(日曜日)に開催されました。

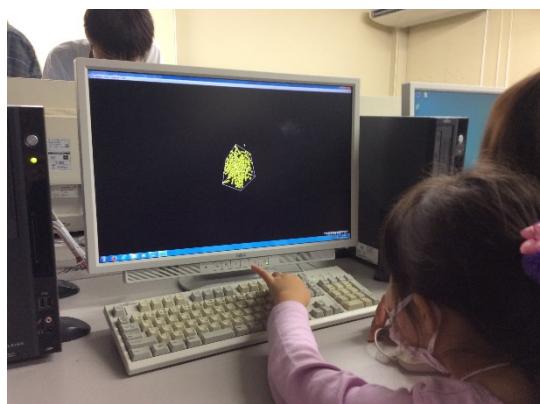
夢大学では、「グラスハープで探る音の不思議」、「微生物ハンター、深海と宇宙に行く」、「科学マジックショー」など数々のイベントが催されました。また、科学実験体験コーナー、ソーラーカーの展示、あるいはスタンプラリーなどを取り入れ、多くの小中学生が楽しめるイベントとなっております。その中でも、「ブチ科学教室」という工学部の各学科から 2 件ずつの体験型授業が行われます。今回、柔らかな分子系協賛という形で、「分子にさわろう！コンピューターを使った分子の世界への探索」という科学教室を行いました。

1 回 1 時間で 10 組を端末室に招き、1 日 4 回の体験型授業を行いました。内容としては、比較的簡単な操作で実行できる分子シミュレーションプログラムを作成し、参加者の皆さんに「シミュレーション」を体験して頂きました。もうひとつは、柔らかな分子系所有の Haptic デバイスをレンタルして、ヘモグロビン、アクチン、ウィルスといった分子を「さわる」あるいは「ひっぱる」といった体験をして頂きました。「分子シミュレーション」「Haptic デバイス」とともに大変好評でした。はじめは、「分子」というだけで小学生には理解で



きないのではないか?など様々な心配はありましたが、小学生の特に低学年の子供たちも、「わっ、デコボコしてる!」とか「硬い!柔らかい!」といった声が聞かれ、分子の世界に興味を持って頂けたのではないかと思っております。また、親子連れの方が多く、親御さんの方にもデバイスを触っていただき、「うわー、こんな感覚なんだ、すごいですね!」とか「なるほどー」といった声が聞かれ、質問もたくさんして頂きました。分子シミュレーションの方では、「分子数」と「温度」を設定してレナードジョーンズ粒子の運動をアニメーション化するものでしたが、これも結構楽しんで頂きました。中には非常に高温に設定する子たちもあり、笑い声のある和やかな雰囲気でしたが、こちらとしては計算が発散しないか冷や冷やしておりました。

他大学でも、一般市民向けの催しにおいて、今回レンタルさせて頂いた Haptic デバイスの使用を是非おすすめしたいと思います。





石山達也博士（富山大） 第7回分子科学会奨励賞を受賞される

森田 明弘（東北大院理・A01 計画研究代表者）

本領域 A01 班の研究分担者である石山達也博士（富山大学）が、第7回分子科学会奨励賞を受賞されました。この賞は 40 歳未満を対象にして、これまで分子科学分野の若手のホープが受賞してきました。今回の受賞業績は、「液体界面の構造、分光、輸送の理論研究」で、石山さんの優秀な業績が高く評価されたことを祝福したいと思います。石山さんのこれまでの共同研究者として、以下に紹介申し上げます。

石山さんは北海道大学工学研究科の機械工学専攻で、気液界面での分子シミュレーションを用いた物質輸送、熱輸送の研究で学位をとられました。機械工学の分野では、気液二相流など不均質系の流体は重要な研究対象ですが、流体力学の記述には界面の境界条件が必要です。石山さんはその境界条件として用いるべき気液界面の性質を、マクロな流体の記述を超えて微視的なレベルで明らかにする研究をされました。

学位取得後に、それまでの研究をさらに分子レベルに進める研究の方向に関心をもって、思い切って分野を変えて、当時分子科学研究所・計算科学研究センターにいた私の研究グループに博士研究員として加わりました。分野のコミュニティこそ違いますが、液体界面を精密に掘り下げるという問題意識で、彼の中では一貫していたと思います。当時私は分子研に助教授として研究グループをもつことができ、計算科学研究センターの豊富な計算資源を使って界面和周波発生分光の理論計算を本格的に始めたところでした。彼はその研究において、立ち上げの段階から非常に大きな役割を果たしてきました。その後、東北大学理学研究科に移動し、助教として学生を指導しつつ界面分光の研究を中心的に推進してきました。彼の界面和周波発生分光の理論研究は、水や氷、電解質水溶液、さらに液液界面や有機溶媒にも及びます。その業績で本年度より富山大学理工学研究部に講師として昇進・転出し、今日に至っています。

石山さんはもともと機械工学の出身ですが、現在では物理化学の分野で独自の地位を築くようになります。

た。彼のキャリアのなかで、分野を変えることは大きな決断でリスクもあったと想像しますが、結果的には大成功であったと思います。それには研究の方向がぶれずに一貫していたことと、彼自身が新しい分野でどんどん知識を吸収して、業績に結び付ける実力があったからこそだと思います。当たり前のことがですが、前例のない新しい計算手法を開発していく際には、数多くの困難を伴うものですが、石山さんの研究遂行の突破力は素晴らしい、ご本人も「執念」という言葉が好きだと言っていました。結果として、物理化学と機械工学にまたがったユニークな立場をつくることができました。

富山大学に移られてからは、和周波分光の研究をさらに発展させて、2 次元分光の理論計算などを理研の田原グループと共同で進めています。さらに水中でのバブルの研究など、新しい展開も見せてくれそうです。今後はこれまでの私のグループとの共同研究はもちろんのこと、分子科学の手法を機械工学の分野にまで拡げていく研究を期待しています。今回の奨励賞には、独立した石山さんに対する分子科学コミュニティの期待が込められていると思います。



分子科学討論会 2014（広島）の授賞式にて
藤井正明分子科学会長（左）と石山さん（右）



持田グループの上田嵩さんが 4th Asia-Pacific Conference on Ionic Liquids and Green Processes / 6th Australasian Symposium on Ionic Liquids (APCIL-4/ASIL-6) において Poster Prize を受賞

持田智行（神戸大学・A03 公募班 研究代表者）

A03 柔らかな分子系計測 公募研究 持田グループ（神戸大学）の研究協力者である神戸大学大学院・理学研究科の上田嵩大氏（博士前期課程 1 年）が、4th Asia-Pacific Conference on Ionic Liquids and Green Processes / 6th Australasian Symposium on Ionic Liquids (APCIL-4/ASIL-6) において、Poster Prize を受賞しました。この国際学会は、平成 26 年 9 月 28 日（火）から 10 月 1 日（金）までの 4 日間、オーストラリア・シドニーで開催されたものです。

イオン液体は、液晶や生体関連分子と並び、柔らかい分子系物質の代表例です。イオン液体に関する研究は近年極めて盛んであり、対象は基礎科学から産業利用まで幅広い分野に及びます。イオン液体に関する国際学会として、International Congress on Ionic Liquids (COIL) が隔年開催されていますが、その間の年に標記の APCIL および ASIL が開催されています。APCIL はこれまで主に中国を開催地としてきた学会であり、ASIL はオーストラリアのシンポジウムですが、今回は両者の合同開催となりました。日本とは季節が逆で上着が必要な気温にもかかわらず、会場近くのビーチは大勢の海水浴客でにぎわっていました。

この学会では、基調講演 6 件、キーノート講演 18 件、招待・一般講演 48 件、ポスター 104 件の発表がありました。日本からは渡邊正義教授（横浜国大）、大野弘幸教授（東京農工大）が基調講演、伊藤敏幸教授（鳥取大）がキーノート講演、その他数名が一般講演を行いました。学会の主題はイオン液体の物質科学、電気化学、分光、分析化学、触媒反応・物質変換、計算科学など多岐にわたり、盛会でした。中国人研究者の参加が目立って多く、研究レベルも高い点が印象的でした。中国では本格的なプラント試験が開始するなど、イオン液体の産業利用にも力を入れている様子です。

上田氏の発表は、100 件以上のポスター発表から選出された 4 件の Poster prize に入りました。同氏の研究対象は、サンドイッチ錯体からなるイオン液体です。通常のイオン液体はイミダゾリウム塩などのオニウム塩であり、比較的単純な有機分子から構成されています。ところが私たちのグループでは、各種の金属錯体

を液化することにより、金属を含む機能性イオン液体を開発してきました。上田氏の課題は、三置換ベンゼンを含むサンドイッチ錯体を用いたイオン液体を合成し、その熱物性を調べたものです。この系では、分子の集合形態と物性の相関に興味が持たれます。イオン液体としては極めて独特な分子設計であるため、発表には組織委員の先生方をはじめ、多くの研究者に興味をもっていただきました。同氏は現在、修士 1 年の学生であり、これからのお研究の発展が期待されます。この研究を基盤として、今後は化学反応性を持つ液体への展開を計画しています。これらの研究は、理論計算・分光研究者との協力に基づく展開により、「柔らかな分子系」の新しい側面を拓くと考えます。

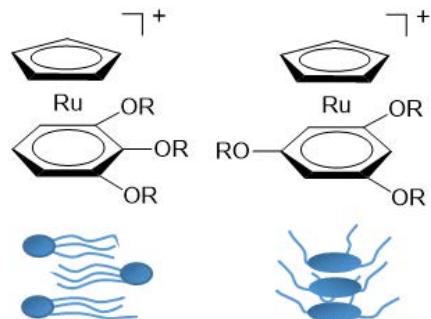


図 1. Poster Prize の対象となったイオン液体分子、およびその集合形態の模式図



図 2. APCIL-4/ASIL-6 において Poster Prize を受賞した上田氏（会場にて、受賞当日）