



国際シンポジウム（第3回公開シンポジウム）開催報告

藤井 正明（東工大資源研・総括班、事務局）

本新学術領域研究の国際シンポジウムが、平成 27 年 7 月 9 日（木）から 7 月 11 日（土）の三日間に渡り、日本科学未来館（東京都江東区青海）で開催された。本シンポジウムには 145 名の参加者があり、口頭発表 24 件、ポスター発表 97 件の成果発表に加え、国際評価委員の先生方による招待講演 4 件が行われた。本シンポジウムは本領域としては第3回公開シンポジウムに対応するが、国際評価委員の先生方をお迎えして国際会議として開催され、広く一般への成果発表のみならず、国際的視点からのご評価、ご助言をいただくことにしたものである。紙面の関係上、国内外の評価委員の先生方のコメントを中心に報告するが、口頭発表はもちろん、3 日目のポスターセッションも時間いっぱいまで熱い議論が行われていたことをご報告したい。

最初に、田原太平領域代表から、新学術領域研究の全体についての着想、構想、領域全体として目指すもの、そして現在まで 2 年間の成果が 283 報の原著論文、77 報の総説、139 の国際会議招待講演になっていることが紹介された。論文の質もハイインパクトジャーナルを含む高いものであるが、紹介された共同研究による成果も顕著であった。たとえば吉沢班員（柔

らかな分子系創成班、A03）と林班員（解析班、A01）のように計画班の間での分子カプセルに関する理論と実験の共同研究成果も目を見張るものであった。しかも、倉重班員（A01）と楊井班員（A03）が行った分子集積による光転換の理論と実験の共同研究は本領域で初めて知り合って実現したものであり極めて強い印象を与えた。さらに、吉田（A01） - 林（A01） - 田原（A02） - 水谷（A02） - 神取（A03）による光駆動ナトリウムポンプのように理論、計測、創成班という領域全体での共同研究は、内容の高度さと共に聴衆に本領域の重要性と意義を強く印象付けたと思われる。

田原代表の講演に引き続き A01 班の概要を北尾 A01 班長が紹介し、8 件の口頭発表と国際評価委員である J. E. Straub 先生、S. R. Meech 先生の招待講演が行われた。翌 10 日は国際評価委員 P. M. Champion 先生の招待講演に始まり、A02 班の概要を水谷 A02 班長が紹介し、引き続き田原代表を含む 8 件の A02 班員の成果が講演された。休憩を挟んでいよいよ A03 班の発表になり、神取 A03 班長の概要紹介に引き続いて超分子創成、機能改変を中心に 6 件の成果発表が行われた。この発表の後には日本科学未来館の研究交流会が開かれた。レインボーブリッジ、東京タワー、ガンダムというお台場ならではの印象的な夜景をバックに参加者の討論はいよいよヒートアップしていった。





最終日は M. Sheves 先生の招待講演に続き A03 班の講演 2 件が行われた。この後、研究代表者で口頭講演しなかった班員によるショートプレゼンテーションとポスターセッションが行われた、昼食を挟んで 3 時間あまりの間、参加者全員で熱い議論が交わされた。

Concluding Remarks では国際評価委員の先生方、総括班評価グループの先生方にコメントをいただいたのでここに概要を紹介する。

P. M. Champion 先生

皆さん全員にこのような印象的な成果を上げられたことをお祝い申し上げる。単なる量ではなく、Scientific に非常に質が高く、かつ全てが特筆すべき水準の成果であり、全員が誇りに思って良い。おめでとう。

S. R. Meech 先生

私も素晴らしい研究を大いに楽しんだ。プレゼンテーションも引き続く議論も高い質のもので、いつにないぐらい楽しんだ。ポスターセッションも全く同じく素晴らしい。私はこの領域の成功と高い評価を確信している。

M. Sheves 先生

このような異なる研究分野を交流させるプログラムは重要で時宜を得たものであるが、本領域では比較的短期間に非常に効果的に異なる分野の研究者による共同研究を促進しており、特筆するべきである。私も他の先生方同様に研究発表を大いに楽しんだ。特に若い世代の研究者による口頭及びポスター発表、そして議論をとても嬉しく思った。招待に感謝するとともにプログラムの成功をお祝い申し上げる。

J. E. Straub 先生

他の国際評価委員とともに特段の水準の研究にお祝い申し上げたい。男性のみならず女性を含む若手研究者の活発な研究はこの science の将来の一層の発展を意味してとても元気の出るものであった。計算科学者としての観点から言うと、ここで発表された分子系は格別に複雑なものであり、北尾班長を始めとするユニークなアプローチは極めて刺激的だった。実験研究との共同研究によるシナジー効果は素晴らしい。私は米国でもいくつもの学際研究プロジェクトの評価を行っているが、このように大きく専門の異なる研究者が緊

密にカップルして実際に意味のあるそして重要な研究成果を上げているものは見たことがない。このような運営も別格に素晴らしいと言うべきである。

北川禎三先生

この領域はまさしく科学のフロンティアである。私は当初、A03 創成班の成果が出るのか、大変気になっていた。特に神取班長は必ずしも分子合成の専門家ではないのでとりわけ案じていた。ところが今回聞いてみてその成果は格別に素晴らしい全く杞憂であった。この班で研究されている系は大変新しいものであり、新しい分子系は分子科学にとって本質的に重要である。その意味でも異なる分野の共同研究は極めて重要である。分子の柔らかさの定義や定量化は難しい問題だが、将来これに道筋がつけられればすばらしいと思う。この領域の研究水準は特段に高い。

渡辺芳人先生

私は物理化学の専門家ではないので細部に至る点までの理解はしていないかもしれないが、研究全体の水準を表す "Flavor" を感じることができる。この領域の "Flavor" は非常によく、好印象である。これは専門外の方がいる公式な評価委員会でも重要な点であろう。機能の発見、機能の創造、機能の転換、これは神取班長の A03 のゴールであるが領域全体にとっても極めて重要である。私は「機能の創造」に込められたメッセージが良いと思う。機能の理解は重要だろうが、ひとたび機能を理解したならば、それを元に何かを創造することが大切だ。今こそ新たな機能の創成にも挑戦してほしい。

本シンポジウムは一般客の来場できる日本科学未来館で行われ、シンポジウム終了後、高校生を対象としてアウトリーチ活動「柔らかな分子に触れてみよう」が行われこちらも大変盛況で好評であった。この運営、演示を行ってくださった北尾班長を始めとするメンバーに感謝申し上げる。

最後に、シンポジウムの開催、進行をお手伝いいただいた、東工大分光化学部門のスタッフ、大学院生のみなさん、そして詳細な準備に尽力してくださった事務局・河内美代子さん、松岡園美さんに心からの感謝を申し上げる。



アウトリーチ活動 高校生のためのサイエンス体験 「柔らかな分子観察しよう」開催報告

北尾 彰朗（東大分生研・A01 計画研究代表者/
総括班アウトリーチ担当）
鎌形 清人（東北大多元研・A02 計画研究分担者）
中西 尚志（物材機構・A03 計画研究代表者）

「柔らかな分子系」では、毎年公開シンポジウムの際にアウトリーチ活動を行っています。今年は「柔らかな分子系」国際シンポジウム（第 3 回 公開シンポジウム）の終了直後、平成 27 年 7 月 11 日（土）の午後に、日本科学未来館（東京、お台場）において、高校生のためのサイエンス体験「柔らかな分子を体験しよう」を開催しました。24 名の高校生の参加があり、このうち 17 名が女性でした。

今回の活動には、前回も参画した北尾・中西に加えて、新に A02 の鎌形も加わり、領域の 3 項目からの講師がすべてそろいました。前回同様に、A01 北尾が「コンピュータでタンパク質の柔らかさに触れよう」、A03 中西が「新種の液体分子をデザインする」、そして新たに A02 鎌形が「顕微鏡で DNA の柔らかな動きを見てみよう」のタイトルで活動を行いました。最初の一時間は 3 人の講師がセミナー形式で説明を行い、残りの一時間半は高校生に 4 種類の体験コーナーをローテーションで体験してもらいました。

今回初めての試みであった「顕微鏡で DNA の柔らかな動きを見てみよう」の体験コーナーでは、蛍光顕微鏡を用いて、実際に DNA が伸び縮みする様子を高校生に見てもらい、とても好評でした。体験した生徒は、「DNA をみることなんてそうある機会ではないので、今日体験できてよかったです。」「DNA は生物の分野だと思っていたけれど、物理的視点からも研究できると知って驚きました。」などの感想をアンケートに書いてくれました。

それ以外の体験は、前回とほぼ同様に行いました。「新種の液体分子をデザインする」では、普通は固体として存在する分子を液体に変化させる方法について、分子のモデルを使って理解してもらい、また、実際に



開発した液体分子そのものを見て、触れてもらい、柔らかな分子を体感してもらいました。「コンピュータでタンパク質の柔らかさに触れよう」のコーナーでは、3D プリンタで印刷したタンパク質と力覚装置を使った体験を個別に行いました。

このような体験は、参加してくれた高校生諸君に様々なインパクトを与えたようです。アンケートに書いてくれた感想には、「将来、創薬の仕事に就きたいと思っていたのですが、研究者の道も興味深いと思いました。」、「今のところ研究に興味はありませんが、今回そのような選択肢もこの後の人生においてあるのか、と思いました。」、また「誰も知らない事や見つけた事がないものを一番最初に見つけ考へることはすごく魅力的だと思った。」など、高校生の皆さんに、将来のことを考えるよいきっかけとなったようです。更に、「生物に興味が無く、今は物理を勉強していますが、先生方も物理を勉強している方が多く、生物も良いのかなと少し興味を持てたかな、と思います。」、「もともと生物科目が好きでしたが、今回の体験でもっと好きになりました。進路を考える時のヒントとして今回の体験を参考にしたいです。」など、高校の科目とは異なる実際の研究を知って、科学への興味の持ち方に変化があった人もいたようです。今後もこのようなアウトリーチ活動を継続していきます。





業績紹介：液液界面のイオン透過の論文が JACS Spotlights で紹介

森田 明弘（東北大理・A01 計画研究代表者）

論文題目："Microscopic Barrier Mechanism of Ion Transport through Liquid-Liquid Interface"

著者：Nobuaki Kikkawa, Lingjian Wang, and Akihiro Morita

雑誌巻号：J. Am. Chem. Soc. **137**, 8022-8025 (2015).
(JACS Spotlights **137** (26), 8311-8312 (2015).)

液液界面をイオンが通過する現象は、抽出、分離、センサー、膜透過など化学のさまざまな分野で現れる基本的な現象であるが、微視的な機構に立ち入った分子科学的な研究は非常に未開拓であった。界面透過の速度を測定すること自体が長年チャレンジングな問題であったが、近年の測定技術の進歩で明らかにされた速度(0.1~1 cm/s)は、拡散律速の予想(~100 cm/s)よりも2-3桁遅い[1]。それは多くの議論をよび、電気分析化学の分野で基本的な問題として残されていたが、本論文はそれを分子レベルで解決することに成功した。

イオンが水相から油相に移動した直後には、水和した水を引き連れて"water finger"[2]と呼ばれる特徴的な構造が現れる

(図 1 (A))。

実際に MD 計算をすると、water finger が形成した状態 (A) と切れた状態 (B) の両方がみられ、顕著なヒステリシスもよく経験する。これは 2 状態を別のものとして扱う必要を示している。

そこで我々はそれを区別する適切な座標 (water finger coordinate) w を定義した。これはイオンと水の水素結合ネットワークのボトルネック長として一意的に定まり、図 1 のピンクの長さに対応する。

そこで液液界面でのイオン移動を記述する際に、イオンの界面垂直方向の位置座標 z に加えて w も考慮し、2 次元の自由エネルギー面をレプリカ交換アンブレラサンプリング法を用いて計算した。得られた自由エネ

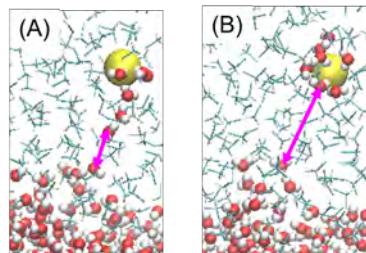
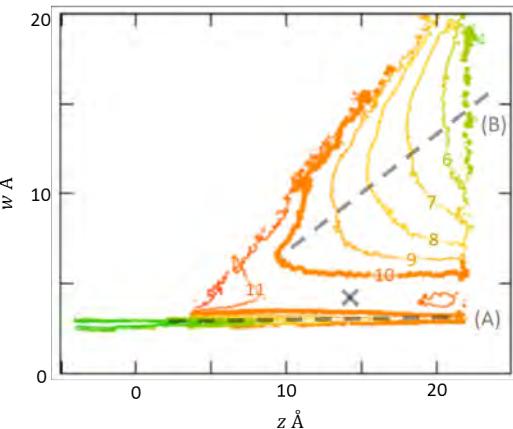


図 1. イオン通過時の 2 状態。(A) water finger 形成、(B) water finger 切断。

Cl⁻イオンは黄色の球、水(H₂O)は赤(O)と白(H)の球、ジクロロメタンは青の棒で示す。

図 2. 水-ジクロロメタン界面での Cl⁻ 移動の 2 次元自由エネルギー面 $G(z,w)$ の等高線図。イオン移動の状況を表すため、外部電場 0.2 V/nm を印加したもの。2 つの谷線(A), (B) (破線) および鞍点 (x) ($z = 14\text{ \AA}$, $w = 4\text{ \AA}$) も示す。

ルギ一面 $G(z, w)$ の等高線図を図 2 に示す。この図には 2 つの谷線 (A), (B) がみられ、それぞれ図 1 に示した 2 状態に対応する。

イオンが水相 ($z \ll 0$) から油相 ($z \gg 0$) に移動する際には、谷線(A)から(B)への遷移が必要で、その際に活性化障壁がある。これまでの MD 計算では、イオンの界面からの位置 z に対する 1 次元の自由エネルギー一面が議論されていたが、そこには隠されていたバリアが本研究で明らかに示された。water finger 構造の変化は 4 kcal/mol 程度の自由エネルギー障壁を伴うことがわかり、実測のイオン移動速度が遅くなる理由をうまく説明する。

本研究の予備成果は、昨年度に共著者の吉川君のポスター賞として評価された[3]。また、本年の 6 月にチエコで開催された液液界面の第 48 回 Heyrovsky Discussion にて発表し、分野の長年の懸案を解決したものとして国際的に大きなインパクトをもって受けとめられ、JACS spotlights の記事でも紹介された。液液界面の構造の柔らかさが物質移動に果たす機能を明らかにしたもので、今後の液液界面の分野で重要な研究の一つとなるものと思われる。

引用文献

- [1] Z. Samec, *Electrochim. Acta* **84**, 21 (2012).
- [2] I. Benjamin, *Science* **261**, 1558 (1993).
- [3] 森田明弘、ニュースレター No. 16 (2014).



業績紹介：ヒストン H2A/H2B 二量体における構造多様性の創出機構解明

七種 和美（広島大・A01 公募研究連携研究者）
渕上 壮太郎（横浜市大・A01 公募研究代表者）
明石 知子（横浜市大・A01 公募研究連携研究者）

論文題目："Mass Spectrometric Approach for Characterizing the Disordered Tail Regions of the Histone H2A/H2B Dimer"

著者：Kazumi Saikusa, Aritaka Nagadoi, Kana Hara, Sotaro Fuchigami, Hitoshi Kurumizaka, Yoshifumi Nishimura, and Satoko Akashi*

雑誌巻号：*Anal. Chem.* **87**, 2220–2227 (2015).

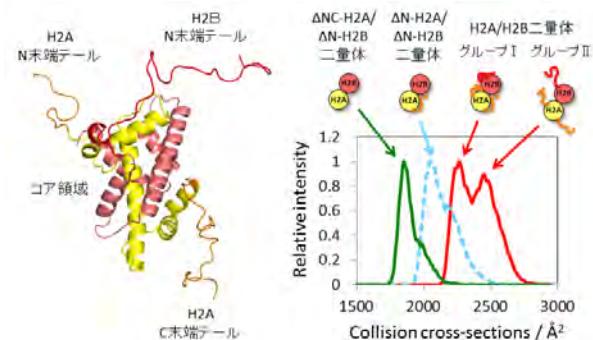
ヒストンは DNA を核内にコンパクトに収納する役割を担う一群のタンパク質である。4 種類のヒストン (H2A, H2B, H3, H4) が 2 分子ずつ集まってヒストン八量体を形成し、その周りに DNA が 2 周ほど巻き付く。この複合体はヌクレオソームと呼ばれ、この状態では DNA の転写が抑制される。DNA の転写が活性化するためには、ヌクレオソームの構造変形やヒストンの解離が必要である。このような変化は、ヒストンの末端部分であるヒストンテールの翻訳後修飾によって誘起・制御されている。ヒストンテールは特定の構造をとらない天然変性領域であり、その柔軟さが機能実現に重要な役割を果たしていると考えられているが、その分子基盤は十分に明らかとなっていない。

我々はこれまでに、柔軟なヒストンテールを含めたヒストン複合体の全体構造やその動的特性を解明すべく、イオンモビリティ質量分析 (IM-MS) と分子動力学 (MD) シミュレーションを組み合わせ、取り組んできた[1]。IM-MS による観測から、気相中で 2 種類のヒストン複合体 (H2A/H2B 二量体と (H3/H4)₂ 四量体) のいずれもが、グループ I と II から成る二峰性の構造分布を取っていることを明らかとした。また、この構造分布がヒストンテールに起因すると考えられることを MD シミュレーションによる構造推定によって示した。しかし、多様な構造が発生する分子機構は不明のままであった。そこで本研究では、ヒストン複合体に構造多様性を生じさせるメカニズムを明らかにするため、H2A/H2B 二量体のさらなる解析を行った。

ヒストンテールには塩基性アミノ酸残基が数多く含まれ、全体として正に帯電している。よって、塩基性残基間の静電反発が、ヒストンテールの多様な構造を

生み出している可能性が考えられる。そこで、ヒストンテールに存在するリジン残基の正電荷をアセチル化によって中和し、IM-MS 測定したところ、アセチル化に伴う質量の変化は観測されたが、イオンの価数や到着時間分布に対する影響はほとんど見られなかった。したがって、ヒストンテールに存在する多くの正電荷は、構造多様性の原因ではないことが明らかとなった。

続いて、ヒストンテールを欠損させた H2A/H2B 二量体を用いて、多様な構造の創出におけるヒストンテールの影響をより詳しく調べた。H2A と H2B の N 末端テールを欠損させた二量体 ($\Delta N\text{-H2A}/\Delta N\text{-H2B}$) と、それに加えて H2A の C 末端テールを欠損させたもの ($\Delta NC\text{-H2A}/\Delta N\text{-H2B}$) を用意し、IM-MS 測定で衝突断面積の分布を算出したところ、いずれの欠損体においてもグループ II に属する構造が大きく減少していることがわかった(図)。これより、ヒストンテールが二峰性の構造分布を生じさせる原因となっていることが直接的に確認された。さらに、水素-重水素交換質量分析による解析を行ったところ、すべてのヒストンテールを欠損させた $\Delta NC\text{-H2A}/\Delta N\text{-H2B}$ 二量体ではコア領域が不安定化し、 α ヘリックスが部分的に壊れてしまっていることが示唆された。つまり、ヒストンテールはコア領域の安定化に寄与していると考えられる。



図：(左) H2A/H2B 二量体の立体構造。(右) H2A/H2B 二量体およびテール欠損体の衝突断面積の分布。

以上の結果より、ヒストンテールのようなフレキシブルな天然変性領域をもつタンパク質やその複合体を研究する上で、IM-MS は重要な知見を与える効果的な解析手法であることが示された。

引用文献

- [1] K. Saikusa *et al.*, *Anal. Chem.* **85**, 4165–4171 (2013).



業績紹介：二次元蛍光寿命相関分光法による蛋白質マイクロ秒ダイナミクスの研究

乙須 拓洋（埼玉大院理工・A02 計画研究協力者）

石井 邦彦（理研・A02 計画研究分担者）

田原 太平（理研・A02 計画研究代表者）

論文題目："Microsecond protein dynamics observed at the single-molecule level"

著者：Takuhiko Otosu, Kunihiko Ishii, and Tahei Tahara

雑誌巻号：*Nat. Commun.* **6**, 7685 (2015).

あるアミノ酸配列を持つ蛋白質がいかにして特有の三次構造へと折り畳まれ、機能を発現するかは蛋白質研究における主要なテーマの一つである。蛋白質の折れ畳みは通常ミリ秒～秒で起こる過程であり、その詳細を深く理解するためには高い時間分解能での測定と定量的な解析が必要である。特に近年では、マイクロ秒スケールでの蛋白質MDシミュレーションが可能となってきたことから、マイクロ秒領域で起こるダイナミクスの、実験と理論の直接比較による分子論的解析が強く望まれている。

本研究では最近我々の研究室が開発を行った二次元蛍光寿命相関分光法(2D FLCS)^[1]を用い、ヘム蛋白質であるシトクロムcのマイクロ秒ダイナミクスの研究を行った。2D FLCS ではある時刻 T に観測された1つ目の蛍光光子と、その ΔT 後に観測された2つ目の蛍光光子の蛍光寿命の相関を解析する。本手法は一分子計測よりも高い濃度条件(=高い時間分解能)で一分子計測と同等の情報を取得可能であるほか、構造変化に敏感な蛍光寿命の解析を行うことで、早い構造間ダイナミクスの定量的な解析を可能にする。測定では、ドナーとなる蛍光色素をシトクロムcのC末端に付与し(アクセプターはヘム)、構造変化をFRETによるドナーの蛍光寿命変化として検出することで、シトクロムcの平衡状態での構造ダイナミクスを解析した。

図1には酸性条件下(pH3.5)で得られた結果を示している。図1に示した二次元マップの縦軸は1つ目の蛍光光子、横軸は2つ目の蛍光光子(1つ目の光子から ΔT 後に観測)の蛍光寿命を表している。検出されたピークのうち、対角線に現れているピークは自己相関を表しており、各蛍光寿命を有する準安定構造の存在を示している。一部重なっているが、 $\Delta T=0.2\sim4\mu s$ (a)での二次元マップより5つの準安定構造が存在していることが確認された。また、蛍光寿命と色素間距離の関係

より、短寿命成分をシトクロムcの天然状態、長寿命成分を変性状態、その他3つの寿命成分を変性中間状態と帰属した。二次元マップには対角項ピークに加え(a)では2つ、 $\Delta T=8\sim12\mu s$ (b)では4つのクロスピークが観測されている。これらのピークは蛍光寿命成分間の相互相関を表しており、対応する二つの構造間でのダイナミクスが検出されていることを意味する。特出すべきは(a)では観測されなかった短寿命成分間のクロスピークが(b)でははっきりと観測されている点である。このことは、対応する2つの蛍光寿命成分間の遷移が(a)と(b)それぞれの ΔT の中間、つまり約5マイクロ秒の時定数で起こっているということを示している。つまり、この結果はシトクロムcの天然状態と変性中間状態間でのダイナミクスが5マイクロ秒で起こっていることを強く示唆するものである。論文では解析によって得たエネルギー地形を議論した(図2)。

本研究により蛋白質のマイクロ秒ダイナミクスの検出と構造への帰属が可能となった。今後のさらなる研究により蛋白質マイクロ秒ダイナミクスに関する理解がより一層深まることが期待される。

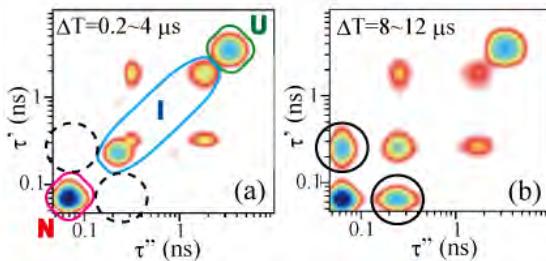


図1. 異なる ΔT で得られた蛍光寿命相関マップ。N, I, U はそれぞれ天然状態、変性中間状態、変性状態を表す。変化の見られた点を黒丸で強調してある。

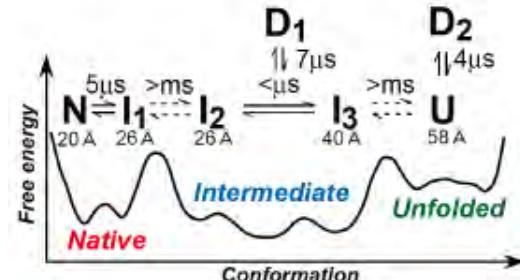


図2. シトクロムcの自由エネルギー地形。得られた構造間転移の時定数、ならびに蛍光寿命から算出した色素間距離も図中に示している。Dは無蛍光状態。

【文献】[1] K. Ishii and T. Tahara *J. Phys. Chem B* **117**, 11414-14122, 11423-11432 (2012).



業績紹介：超高速分子回転ダイナミクスの高解像度イメージング

水瀬 賢太 (東工大・A02 公募研究代表者)
大島 康裕 (東工大・分子研・
A02 公募研究連携研究者)

論文題目："Quantum unidirectional rotation directly imaged with molecules"

著者：Kenta Mizuse, Kenta Kitano, Hirokazu Hasegawa,
and Yasuhiro Ohshima

雑誌巻号：*Science Advances*. 1, e1400185 (2015).

分子の動的挙動を研究する立場において、分子の運動をリアルタイムで明瞭に可視化することは研究の方法論であるとともに、大きな目標の一つとなっている。我々のグループでは、主に分子間振動のような低振動数のダイナミクスに注目し、その運動を詳細に観測することを目指してきた。こうしたダイナミクスは、室温以下のエネルギー域でもランダムに励起されてしまうため、明瞭な観測が困難だった。本論文は、近年発展してきた分子の光制御法を応用し、新規に開発した高分解能イメージング法と組み合わせることで、分子がピコ秒の時間スケールで一方向に回転する様子を連續写真としてとらえ、運動の視覚的理解を可能にした成果についてまとめたものである。

近年、分子ダイナミクスの制御法が盛んに研究され、分子の回転や torsion などの低振動モードの選択的励起が報告されている¹。多くの方法では、分子に強いレーザー電場を照射し、分子運動を誘起する。今回対象とした分子回転については、偏光方向の異なる 2 パルスを照射することで、動的キラリティを導入し、一方向に回転する分子集団の実現が報告してきた¹。このような系を画像観測すれば、分子運動に関して明瞭な知見が得られると期待されるが、前述のようなレーザーを用いた制御法では、レーザーの進行軸と分子回転軸が一致してしまうため、回転軸上に検出器を配置できない問題点があった(図 1)。本研究では、イメージング用パルスで生じたイオン種を 2 段階に加速することで、レーザー同軸の運動をも高解像度で観測する、新たなカメラアングルを発見し、測定原理の段階から装置の設計・開発を行った(図 1)。

今回開発した装置によって観測した分子回転ダイナミクスの例が図 2 である。時間経過とともに、分子配向の最確角度が反時計回りに回転していることが見て

取れる。更に重要なことに、分子配向分布が分裂し、X 字形になる様子も観測された。これは、分子回転が複数の波の成分を含むための分裂として理解でき、運動の量子性まで含めた可視化ができたことを示している。

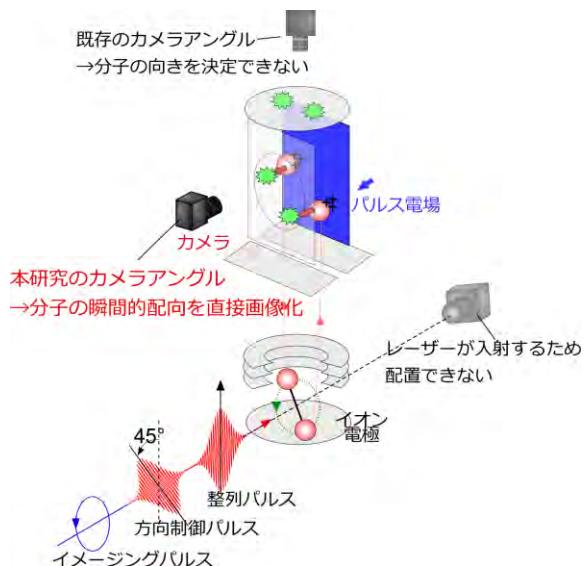


図 1 開発したイメージング装置のカメラアングルと既存の手法の比較

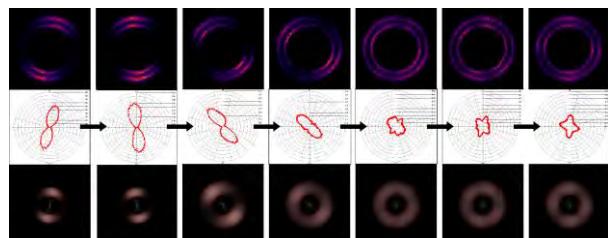


図 2 観測した分子回転ダイナミクスの例。(N₂ 分子, 167 fs ごと。上段から、観測画像、配向分布関数、分布関数から作成したダンベルモデル分子による描像)

本論文は、主に分子の回転運動に重点をおいたが、今後は、低振動ダイナミクスの重要な系である非共有結合性の分子集合体に対象を広げ、その分子間ダイナミクス観測に注力する。また本研究では、分子の回転、内部回転、ねじれ振動のような、角度の変化を鋭敏に捉える観測方法を開発した。本学術領域においても、本アプローチによる、分子の「機能的な動き」の視覚的理解・評価につなげていきたいと考えている。

引用文献

- [1] K. Kitano et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 223002 (2009).



業績紹介：AFM・STM 同時測定による原子種特定と 3 次元分子イメージング

清水 智子 (NIMS・A02 公募研究代表者)

論文題目："Imaging Three-Dimensional Surface Objects with Submolecular Resolution by Atomic Force Microscopy"

著者：Cesar Moreno, Oleksandr Stetsovych, Tomoko K. Shimizu, and Oscar Custance.

雑誌巻号：*Nano. Lett.* **15**, 2257-2262 (2015).

論文題目："Atomic species identification at the (101) anatase surface by simultaneous scanning tunneling and atomic force microscopy"

著者：Oleksandr Stetsovych, Milica Todorovic, Tomoko K. Shimizu, Cesar Moreno, James William Ryan, Carmen Perez Leon, Keisuke Sagisaka, Emilio Palomares, Vladimir Matolin, Daisuke Fujita, Ruben Perez, and Oscar Custance.

雑誌巻号：*Nat. Commun.* **6**, 7265 (2015).

上記 2 報の論文は、分子が吸着した表面において単原子・単分子レベルで現象を理解するために必要な要素技術の開発成果を報告するものである。

原子解像度での物質表面の観察の有効な手法として、走査トンネル顕微鏡(STM)と原子間力顕微鏡(AFM)が挙げられるが、得られた像をどう解釈するのかは難しい。STM であれば、物質の電気の流れやすさ(正確には電子状態)を反映した凹凸が現れ、AFM では探針一試料間に働く力を反映した凹凸が現れる。今回開発したひとつ目の技術は、AFM で原子解像度像が得られた場合、どのようにして原子の種類を特定することができるか、その一つの方法を示すものである。ここでは、複雑な構造をもつアナターゼ型酸化チタンの表面について、AFM と同時に STM 像を取得する技術を応用した[1]。アナターゼは光触媒や太陽電池材料などに使用するエネルギー材料として注目され、近年開発が進んでいる。しかし、これまでこの表面は高解像度の AFM で観察されたことがなく、原子や欠陥の状態を理解するには至っていない。AFM/STM 同時測定の良いところは、片方(今回は STM 像)が既知であればもう片方(今回は AFM 像)を新しい情報として得られる点である。すでに吸着サイトと STM 像が知られている水分子を故意に表面に吸着させることで、AFM 像で明るく映る楕円は最表面にある酸素原子であることを見き止めた(図 1)。また、第一原理計算との比較か

ら、欠陥の特定にも成功した。

もう一つの開発した技術は、3 次元的な形状をもつ分子でも、有機分子の骨格をボール・スティックモデルのように映し出す AFM の手法である[2]。2009 年に IBM のグループにより開発された手法では、平坦な分子が表面に対して平らに吸着した場合にしか像が得られないという弱点があった。3 次元分子の代表であるフラーレン C_{60} 分子について、今回開発したマルチパス法(2 パス法)で像を取得すると、図 2 に示すように球の上半分の骨格が鮮明に現れ、サッカーボールのように 6 角形や 5 角形が組み合わさっていることが見て取れる。

今回開発した 2 つの手法は、アナターゼのように電気が流れにくい材料でも使えるところが売りであるが、もちろん電気がよく流れる金属や全く流れない絶縁体を基板としても使える。今後、生体分子や機能性有機分子、無機-有機複合体など、AFM や STM での観測が難しいと言われる材料に挑戦していきたい。

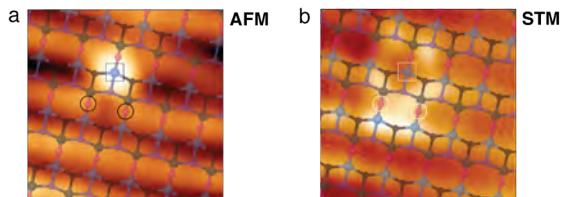


図 1. 水単分子が□のサイトに吸着したアナターゼ型酸化チタン(101)表面の AFM(a)/STM(b)同時測定。基板のアナターゼの構造を重ねてある。赤：最表面の酸素、青：第 3 層のチタン。

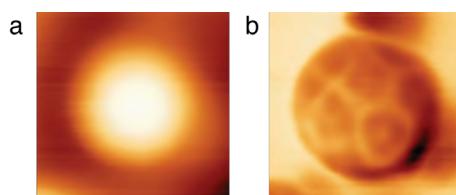


図 2. (a) 通常の力一定のフィードバックで取得した AFM 像。(b) 今回開発したマルチパス法(2 パス法)で取得した AFM 像。試料はアナターゼ型酸化チタン(101)表面に吸着した C_{60} 分子。

引用文献

[1] O. Stetsovych *et al.*, *Nat. Commun.* **6**, 7265 (2015).

[2] C. Moreno *et al.*, *Nano. Lett.* **15**, 2257-2262 (2015).



業績紹介：光照射により結晶化するイオン液体

楊井 伸浩（九大院工・A03 公募研究代表者）

論文題目："Photoinduced Crystallization in Ionic Liquids: Photodimerization-induced Equilibrium Shift and Crystal Patterning"

著者 : Shota Hisamitsu, Nobuhiro Yanai, Shigenori Fujikawa, and Nobuo Kimizuka

雑誌巻号: *Chem. Lett.*, 44, 908-910 (2015). *Editor's choice*

我々はトリプレット（励起三重項）の科学に興味があり、特に本新学術領域では分子性材料の「柔らかさ」がいかにトリプレットの挙動に影響を及ぼし、制御しうるかについて精力的に研究している。そのような中、光を照射すると結晶を発生させるイオン液体（図1）という、当初想定していなかった興味深い材料を発見し、本論文を報告した。

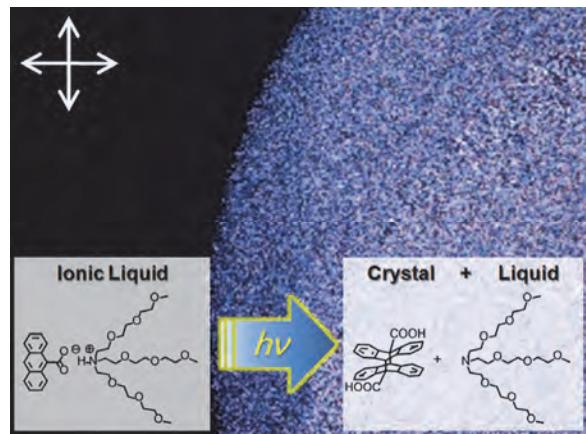


図1. 光を照射することでイオン液体から結晶が析出

今回用いた新規イオン液体は、9-アントラセンカルボン酸と柔軟なジエチレングリコール鎖を有するアミンから合成した塩である（図1）。このイオン液体の発光する様を観察しようと顕微鏡下で紫外光を照射したところ、みるみるうちに結晶が成長していく様子が観測された（図2）。光照射後のサンプルをIR、¹H NMRにより解析したところ、9-アントラセンカルボン酸のダイマーが生成し、イオン液体から相分離することで結晶として析出していることが分かった（図1）。

この9-アントラセンカルボン酸のダイマーと今回用いたアミンを溶液中で混合すると、¹H NMRより溶液中では塩を形成していることが分かった。すなわち、

無溶媒状態においてイオン液体状態を安定にとらないため結晶として析出したこととなるが、これは二量化による pK_a の変化とダイマータイプの凝集力の強さによると現在は考えている。

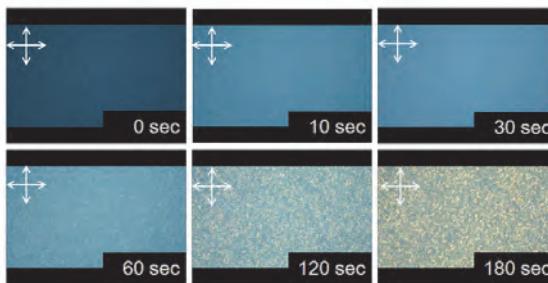


図2. イオン液体に顕微鏡下で紫外光を照射すると、数分のうちに全体が結晶で覆われる

一見、アントラセンの光二量化を用いたよくありそうな結果と思われるかもしれない。しかし実は、中々に示唆に富んだ系である。第一に、ダイマータイプが相分離する際に、カウンターアイオンとして存在していたアンモニウムカチオンからプロトンを受け取っている。つまり、外部刺激によるミクロな変化（プロトンの授受）とマクロな変化（相分離）が密接に関係しており興味深い。第二に、「光刺激により切り離しうるイオン（photo-detachable ion）」という概念を提供しうることである。すなわち、プロトンの授受によりアンモニウムイオンをアミンとしてマクロに切り離すことができる。このアミンの切り離しは材料の物性を大きく変化させる。例えば生成したダイマータイプの結晶は元のイオン液体や生成したアミンとは溶媒への溶解度が大きく異なる。このことを利用したデモンストレーションとして、結晶以外の成分を溶媒により洗い流し、結晶のパターンングが可能であることを示した（図3）。

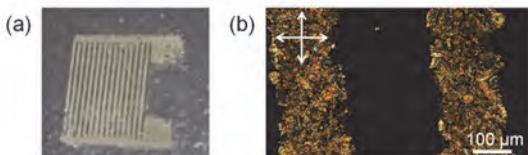


図3. “photo-detachable ion” の概念によりダイマータイプ結晶の光パターンングを達成

今回の結果は「柔らかさのスイッチング」により物性を動的に変換した、とも捉えることができ、今後の材料設計に一つの指針を与えると期待される。



業績紹介：「柔らかさのスイッチング」による励起エネルギーとスケープ制御； 凝集誘起フォトン・アップコンバージョンの発見

楊井 伸浩 (九大院工・A03 公募研究代表者)
倉重 佑輝 (分子研・A01 公募研究代表者)

論文題目："Aggregation-Induced Photon Upconversion through Control of the Triplet Energy Landscapes of the Solution and Solid States"

著者 : Pengfei Duan, Nobuhiro Yanai, Yuki Kurashige, and Nobuo Kimizuka

雑誌巻号 : *Angew. Chem. Int. Ed.*, 54, 7544-7549 (2015).

我々はトリプレット（励起三重項）の科学に興味があり、本研究は「分子の集合化により“柔らかさをスイッチング”し、トリプレットの挙動を動的に制御できないだろうか？」という発想のもと行ったものである。関連する現象として、分子が凝集することで発光挙動をスイッチングする aggregation-induced emission (AIE) に関して近年多くの報告があるが、ほとんどは励起一重項を対象にしている。一方我々は最近、三重項が関わる現象、特に三重項—三重項消滅 (TTA) を経るフォトン・アップコンバージョン (UC) を分子集合系へと展開している[1]。今回は分子の凝集化により TTA-UC 発光をスイッチングする現象 (aggregation-induced photon upconversion; iPUC) を初めて見出し報告した（図 1）。

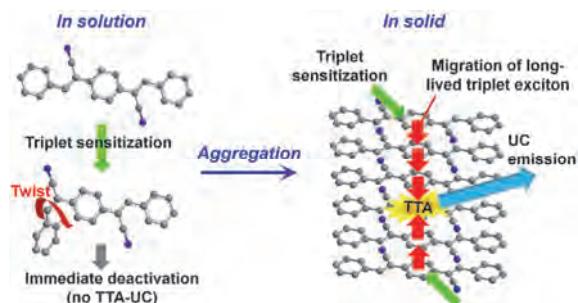


図 1. 今回見出した iPUC 現象のメカニズム

発光分子として、今回のコンセプトを明確に示すため、典型的な AIE 分子であるシアノ基修飾オリゴフェニレンビニレンを用いた[2]。三重項増感剤とこの発光分子を溶液中に共存させたが、全く TTA-UC 発光は観測されなかった。一方、この溶液をキャストした結晶状態では明確に TTA-UC 発光が観測された（図 2）。

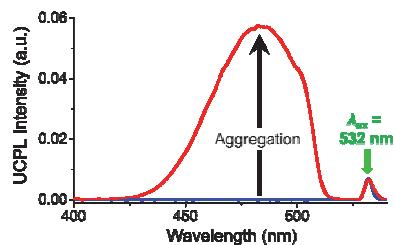


図 2. 溶液状態（青線）から結晶状態（赤線）にすることで TTA-UC 発光をスイッチングできる

この iPUC 現象のメカニズムを理論計算により明らかにした（図 3）。溶液中では発光分子の T_1 状態が $C=C$ 結合のねじれを伴い安定化する過程で、 S_0 状態のエネルギー曲線と交差し、速やかに基底状態へと失活する。一方、結晶状態ではこのような大きな結合のねじれが抑制されるため、トリプレット(T_1 状態)の寿命は TTA を起こすのに十分なほど長くなる。すなわち溶液系から結晶系へと「柔らかさをスイッチング」することで、トリプレットのエネルギーとスケープ制御し、iPUC 現象の発現に繋がった。

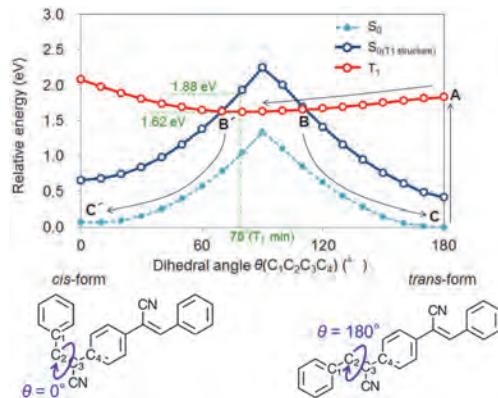


図 3. 発光分子のポテンシャルエネルギー曲線

最後に、筆者らは本新学術領域で初めて知り合い、共同研究を開始したが、この共同研究なくして本論文は完成し得なかつた。貴重な出会いの機会を頂いたことに感謝申し上げる。

参考文献 : [1] N. Yanai, N. Kimizuka *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 19056; *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 1887; *Sci. Rep.* **2015**, 5, 10882; *Nat. Mater. in press*; [2] S. J. Yoon, S. Y. Park, *J. Mater. Chem.* **2011**, 21, 8338.



業績紹介：分子量の揃ったポリ（置換メチレン）の合成法開発

井原 栄治（愛媛大院理工・A03 公募研究代表者）

論文題目：“Pd-initiated Controlled Polymerization of Diazoacetates with a Bulky Substituent: Synthesis of Well-defined Homopolymers and Block Copolymers with Narrow Molecular Weight Distribution from Cyclophosphazene-containing Diazoacetates”

著者：Hiroaki Shimomoto, Hironori Asano, Tomomichi Itoh, Eiji Ihara,*

雑誌巻号：*Polymer Chemistry* 6, 4709-4714 (2015).

炭素—炭素結合(C-C)を主鎖骨格とするポリマーは、学術的および工業的に最も重要な合成高分子の一つである。これまでその合成は専ら、炭素—炭素二重結合(C=C)を有するモノマーの付加重合(ビニル重合)により行われてきた。その重合により得られるポリマーは、特殊な例を除いて、置換基を主鎖の炭素一つおきに有する構造をしている。これに対して、もしも主鎖の炭素全てに置換基を有するポリマーの合成[ポリ(置換メチレン)合成]が可能になれば、このC-Cを主鎖とするポリマーの化学に新たな展開をもたらすことが期待できる(図1)。

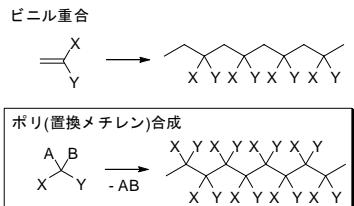


図1 ビニル重合とポリ(置換メチレン)合成

我々は、ポリ(置換メチレン)合成の手法として既に、Pd錯体を開始剤とするジアゾ酢酸エステルの重合による、主鎖の全ての炭素にアルコキシカルボニル基(エステル)が結合したポリマーの合成法の開発に成功している。この重合法を用いて、水酸基(ニュースレターNo. 11に掲載)を始めとする各種の官能基をエ斯特部に導入したポリマーを合成し、その特徴的な物性の発現の可能性について検討している。特に、本領域の研究課題として、ピレンやBODIPY等のπ共役系の置換基を有するジアゾ酢酸エ斯特の重合により、これらの置換基がC-C主鎖の周囲に高密度に集積した

ポリマーを合成し、その光物性の調査を実施している。

このジアゾ酢酸エ斯特の重合において、分子量の揃ったポリマーや、異なるモノマーを順次添加していくことによる配列の制御されたブロックコポリマーの合成を可能とする“リビング重合”的実現が、未だ達成されていない大きな課題であった。このリビング重合が実現できれば、π共役系置換基の配列を制御して主鎖周囲に集積させることも可能となり、幅広い応用が期待できる。

本論文では、そのジアゾ酢酸エ斯特のリビング重合を初めて実現した結果について報告している。π-allylPdCl / NaBPh₄系という独自に開発した開始剤系を用い、モノマーとしてホスファゼンと呼ばれる立体的に嵩高い置換基をエ斯特部に有するものを用いると、分子量の揃った($M_w/M_n < 1.1$)ポリマーが得られた(図2)。同じ条件下において、例えはジアゾ酢酸エチルやベンジルといった立体的に小さい置換基を有するモノマーの重合では分子量の揃ったポリマーは得られないことから、ここでのリビング重合の実現にはエ斯特部の嵩高さが影響しているといえる。このことは、ホスファゼン以外の嵩高い置換基を有するモノマーの重合でも、やはり分子量の揃ったポリマーが得られることによって確かめている。さらに、ホスファゼン環上の置換基が異なる2種のモノマーを2段階で開始剤に添加したところ、効率よく分子量の揃ったブロックコポリマーを得ることができた。

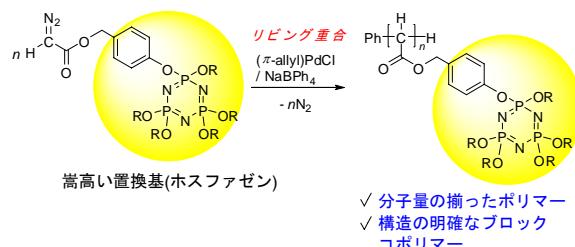


図2 ホスファゼン含有モノマーのリビング重合

以上の結果を元にして、今後、各種のπ共役系置換基の配列を制御したポリマーを合成し、それらの置換基がC-Cの周囲に集積することによる特徴的な光物性の発現について検討し、新たな光機能性高分子の開発を目指していく予定である。



業績紹介：気水界面上での分子ペンチの力学的構造制御

中西 和嘉 (物材機構・A03 公募研究代表者)

論文題目 : Mechanochemical tuning of binaphthyl conformation at the air-water interface

著者 : D. Ishikawa, T. Mori, Y. Yonamine, W. Nakanishi*, D. L. Cheung*, J. P. Hill, and K. Ariga*

雑誌巻号 : *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2015, 54, 8988–8991.

分子で機械の部品を作り、それらナノサイズの機械を自在動かすことは、ナノテクノロジーの夢である。目に見えるマクロなレベルでは、力学的エネルギーがどのように機械を動かすために使われるかについても良く理解されており、広く応用されている。一方、分子でできたナノサイズの機械（分子マシン）は、力を刺激として応答するセンサー材料や、エネルギー変換材料への応用を目指して研究が行われてきたが、力が分子にどのように伝わり、構造や機能に影響するのか、測定する方法が限られており、あまりよく知られていないかった。このような動作原理を理解することは、力学的エネルギーを分子レベルで用い、分子レベルの機械を自在に動かすために必須である。

我々の研究では、三次元ではなく、二次元に次元を落とした気水界面で分子マシンを扱うことにより、単純化し、その力学的構造制御や観測、考察を可能とした。本研究では、分子マシンとして、ペンチの形を模した、キラルな両親媒性ビナフチル分子を用いた（以下、ビナフチル分子）(図 1 a)。ビナフチル分子は、気水界面に向きをそろえて並び、单分子 1 層の集まりから成る超分子膜（单分子膜）を形成する（図 1 b）。单分子膜を外から力学的エネルギーを加えて圧縮したり、拡張させたりすると、ビナフチル分子のペンチの開き具合に対応する角度が変化し、ペンチが開閉する動きに似た運動をすることが分かった。

気水界面で形成した单分子膜を圧縮し、徐々に力学的エネルギーを与えていくと、構造の指標となる、分子あたりの CD 強度が増強することを観測した（図 2 a）。理論計算により、ビナフチルの開き具合を徐々に小さくしていくと、CD 強度が増強することが示唆され（図 2 b）、このシミュレーションと観測結果を比較し、ビナフチルの開き具合を表す角度は、安定構造である−90 度から、圧縮により−80 度まで鋭角方向に変化することが分かった。また、单分子膜の圧縮と拡張

により、この分子ペンチの閉開は連続して起こすことが可能であることも確認した。

力学的エネルギーを利用した分子構造の制御は、歴史的には、結晶に大きな力を加えることで、分子構造を変化させる研究がなされてきたが、近年、より大きな変化や応用性が見込まれるソフトマテリアルでの研究が始まっている。結晶中では、分子は配向しているため、外部から力を加えると、分子に対しても望みの方向に力を加え、変形させることが可能だが、許容される変化率は、ほとんどの場合体積にして 1%未満と小さく、発展性が限られる。一方、ポリマーなどのソフトマテリアルでは、大きな変化率を許容するというメリットがあるが、材料中の分子の配向性が低く、望みの方向に効率よく、力を分子に伝えることが困難でした。我々は、分子の配向性を高く保つつつ、大きな変化率を許容する気体と水の界面（気水界面）を、力学的エネルギーを用いて分子構造を制御する場として利用した。本技術は、柔らかい分子構造を精密に制御する新しい方法であるとともに、簡便な新しいナノ技術となることが期待できる。

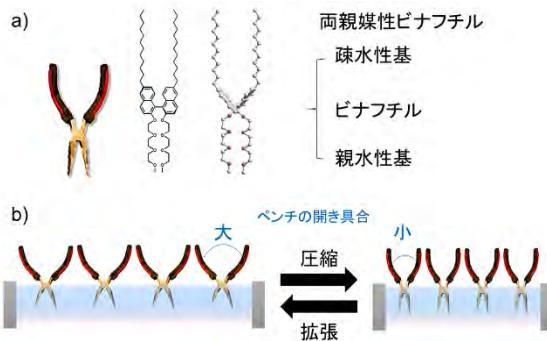


図 1 両親媒性ビナフチルの構造と、気水界面での圧縮による分子変形の模式図

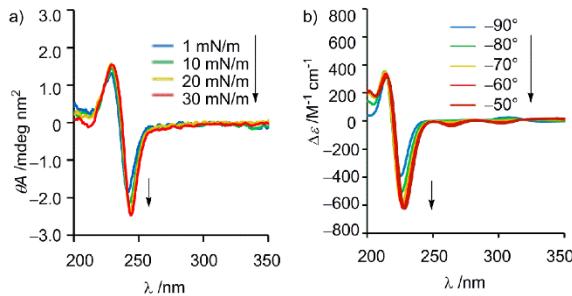


図 2 気水界面で行った力学刺激による CD スペクトル変化 a)実験結果 b)シミュレーション結果



A02班・田原グループの研究成果が各種メディアに取り上げられました

ニュースレター第23号にて紹介したA02班・田原グループの研究成果が理研よりプレスリリースされ、各種メディアに取り上げられました。

- ・理研プレスリリース http://www.riken.jp/pr/press/2015/20150707_2/
 - ・日刊工業新聞 2015年7月8日朝刊
 - ・日経バイオテク ONLINE 2015年7月7日、<https://bio.nikkeibp.co.jp/article/news/20150707/186124/>
 - ・日刊工業新聞 Business Line 2015年7月8日、<http://www.nikkan.co.jp/news/nkx0720150708eaap.html>
 - ・Laser Focus World Japan 2015年7月9日、<http://ex-press.jp/lfwj/lfwj-news/lfwj-science-research/8452/>

理化研究所の乙須拓洋各員研究員、石井邦彦専任研究員、田原太平主任研究員らは、從来比100分の1の
数25秒（マイクロは1
00万分の1）の時間
解像度でたんぱく質の
構造変化を計測できる
手法を開発した。スー
パー・コンピューター
「京」なら最新鋭の計
算機で得られるたんば
く質の分子シミュレー
ーション結果と比較でき
るようになる。理論計
算との連携で創薬など
の開発スピードを上げ
られる可能性がある。

この時間が短くなる
と、たんぱく質と蛍光
色素の距離が縮まって
いることを示してある。
解析結果から、あ
る瞬間に特定の構造を
成就是7日、英會員
版科学誌ネイチャード
コミニケーションズ
に掲載された。

蛍光色素を結合させた
たんぱく質にレーザー
光を照射。蛍光色素が
レーザー光を吸収し、
さらに蛍光色素から光
が出て検出器に到達す
るまでの時間を計測し
た。

たんぱく質の構造変化追跡

理 研

日刊工業新聞 2015年7月8日

朝刊 23 面より許可を得て転載

記事の著作権は日刊工業新聞社に
属します

運動に関する音母由來のたんばく質「シトクロムC」の構造変化を調べたところ、五つの異なる構造を取ることを明らかにした。さらにこの実験から、分子レベルでの構造変化を検出できることは分かつていいない。

たんばく質が機能を発揮するには特定の立体構造を取る必要がある。だが、どのようなメカニズムでたんばく質が構造を変え、特定の立体構造を形成するかは分かつていいない。



A02 公募班・水瀬グループの研究成果が新聞・各種メディアに掲載される

A02 班の水瀬（公募研究代表）、大島（連携研究者）らの研究成果（今月号の業績紹介参照）が 2015 年 7 月 19 日の The Japan Times、7 月 17 日の科学新聞、7 月 8 日の財経新聞をはじめ、Asian Scientist Magazine、Phys.Org.、Youtube (INAF TV 社)などで紹介されました。中でも、我々の撮影した分子回転の「映画」全編を含む INAF TV による動画は、アップロード後 2 日で 2000 回超の再生回数を記録しました（下図）。分子の動画を撮影することによって運動を視覚的に理解することは、様々な分子の動的機能を評価し、さらには設計することにつながると期待されます。

The Science News 學術新聞 2015 年 (平成 27 年) 7 月 17 日 (金曜日)

2015 年 7 月 17 日科学新聞より
許可を得て転載

YouTube JP

每秒 1000 億回の分子回転運動
高解像度動画撮影に成功
—分子研と東工大の研究グループ—

Movie by Kenta Mizuse & Yasuhiro Ohshima
Creative commons soundtrack by Vladimir Sterzer

Quantum unidirectional rotation directly imaged with molecules

INAF TV

3,191

https://www.youtube.com/watch?v=NcUucMFUedE



若手海外派遣報告 UPON2015@バルセロナ

林 久美子（東北大・A01 公募研究代表者）

若手海外派遣支援をいただき、バルセロナで行われた研究会 Unsolved Problem on Noise (UPON) 2015 に参加してきた（2015/7/12-16）。UPON は 3 年おきに開催される「ノイズとゆらぎ」に関する会議で、今年は第 7 回を迎えた。

主なセッションは以下の通り。

1. Fluctuations in Biological systems (生物系はここ)
2. Fluctuations in material and devices
3. Theoretical trends in noise and fluctuations
4. Noise in complex and non-linear systems
5. Quantum noise and coherence

今回の会議のお目当ては、なんといっても、かつての留学先である Felix Ritort 研究室（バルセロナ大学物理学科 Small Biosystems Lab）の発表である。揺らぎの定理や Jarzynski 等式などの非平衡統計力学関係式の実験への応用という観点で、先駆的な研究を行う研究室で、私のお手本である。Felix 自身、以前はスピングラスの理論研究者であった。Felix はバークレー (USA) の Bustamante に弟子入りし、mini-tweezers と呼ばれる高性能の光ピンセット技術をバルセロナに持ち帰り、RNA/DNA ヘアピンの 1 分子実験分野に転向したのである。当時、理論を学ぶために留学した私に実験を押し付けてきたのは Felix だ。（今となってはそれが良かった）

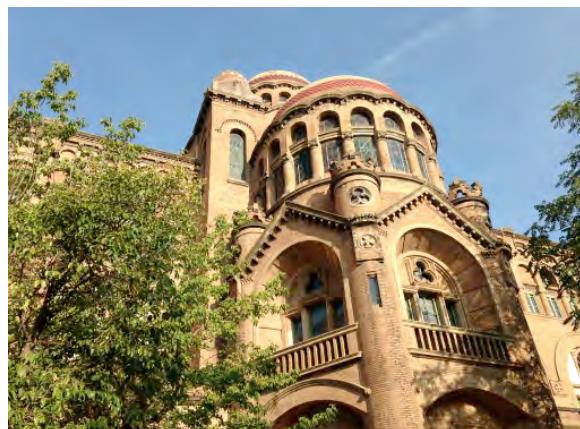
Joan Camunas 氏（右写真、私の友人）の講演では RNA ヘアピンで ligand binding がある場合について Crooks の揺らぎの定理を応用した研究が紹介された。この話とは別に、彼のポスター発表では、DNA ヘアピンに mini-tweezers でランダム力を加え、同じくランダムポテンシャルを持つガラス系で知られる有効温度を調べた研究を紹介していた。1 分子実験で有効温度（非平衡温度）の研究は初の試みであり、Nature physics にアクセプトが決まっているそうだ。Joan の 2 つの研究の話を聞きながら、Ritort 研究室のむちゃくちゃに（相変わらず）ブルトーザーのように実験を進める様を見て、私も躊躇せずにやらないと（迷いすぎ）、と反省した。

Ritort 研究室の新人たちのポスターも聞いた。Xavier Viader 氏は、DNA の伸張を記述する worm like chain モデルの見直しを行っていた。double stranded DNA (dsDNA) と比較して single stranded DNA (ssDNA)

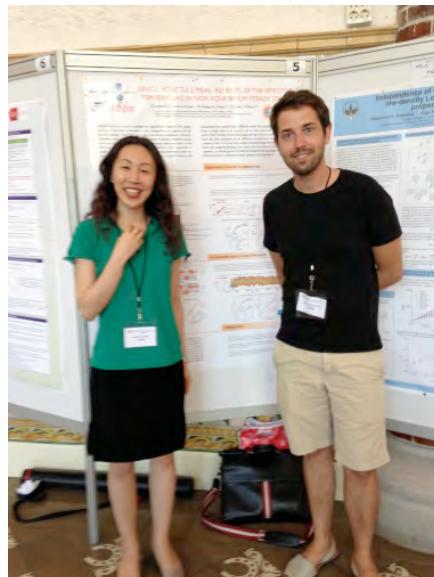
の弾性的性質はあまり研究されていない。ssDNA の長さ-力関係は worm like chain model で記述できない。

同じく新人の Marc Pasto 氏のポスターでは mini-tweezers の温度制御の話を聞いた。今は既にマドリードに戻ってしまった Sara de Lorenzo 氏が作った装置で、Sara をよく知る私には懐かしい話だった。（研究結果より Sara の話になってしまった…）

会場以外で、かつての共同研究者である Maria Manosas 氏とも会うことが出来、バルセロナで生きる人たちの近況を聞いた。海外派遣支援のおかげで再び Ritort 研究室のパワー（元気）をもらうことが出来、自分の研究における迷いがふっきれた旅であった。



UPON2015@バルセロナの会場



かつての留学先 Felix Ritort ラボの研究員(Joan)と



国際会議 TRVS 2015 参加及び Fayer 研究室訪問報告

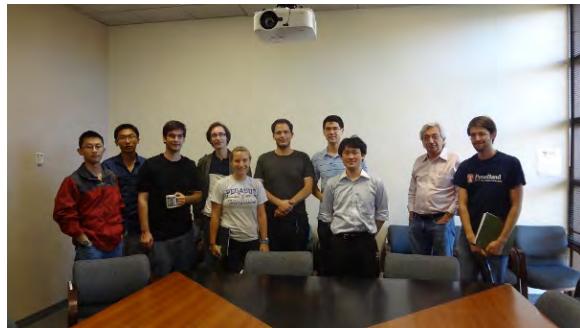
近藤 正人（阪大院理・A02 水谷グループ・研究協力者 博士研究員）

本領域における若手研究者海外派遣の支援を受け、2015 年 6 月 21 日から 30 日までの日程でアメリカ合衆国に渡航した。日程前半では、ウィスコンシン大学で開催された国際会議 TRVS2015 に出席し、ポスター発表を行った。後半では、スタンフォード大学の Michael Fayer 教授の研究室に訪問し、実験室見学及びセミナーを行った。

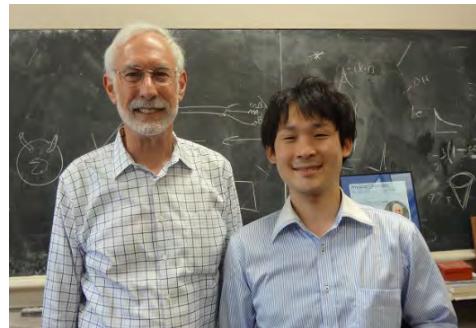
TRVS 国際会議は、時間分解振動分光法 (Time-Resolved Vibrational Spectroscopy) を用いた最新の研究成果を議論する場である。本研究分野における最も重要な会議の一つであり、今回の開催が 17 回目となる。6 日間で 22 件の招待講演、25 件の一般口頭講演、及び 145 件のポスター発表が行われ、最先端の研究成果を存分に聞くことが出来た。私は、「タンパク質中のエネルギーフローの時空間マッピング」に関する研究発表を行った。同分野における国外の研究者の視点から、多くの意見を頂くことができた。発表を通して、今後の研究展開について、はっきりとした見通しがたったように思う。光栄なことに、私の発表は Poster Award に選定された。受賞の詳細については、既に前回のニュースレターで報告させて頂いた通りである。私が本会議に出席したのは今回が初めてであった。そのため、出席者の中に知り合いが少ないことが不安であった。しかし、初日のコーヒーブレイクの時間に、多くの方が親しく話しかけてくれたおかげで、すぐに会議の雰囲気に打ち解けることができた。会議中に、国外における同世代かつ同分野の研究者と交流できたのは非常に良い機会であった。

会議出席後、スタンフォード大学の Fayer 教授の研究室を訪問した。Fayer 研究室では、二次元赤外分光法をはじめとする超高速分光法の開発が進められており、液晶や高分子等の複雑系において非常に短い時間領域で起きる構造変化や分子間相互作用の解明を目指した研究が精力的に行われている。訪問では、まず最先端の実験装置を見せて頂いた。研究テーマに合わせて複数の装置があり、各自に取り組んでいる学生に装置を紹介頂いた。個々の学生は自分が使用している装置を熟知しており、熱心に説明してくれた。また、彼らが装置の現状に満足しておらず、更なる開発に高い意欲を持っていたことも印象深かった。見学後は、私の研究に関するセミナーの機会を設けて頂き、タンパク質内エネルギーフローに関する研究の簡単な紹介を行った。Fayer 教授は会議のため、あいにく参加頂けなかったが、参加頂いた学生や研究員の方から多くの質問とコメントを頂くことができた。20 分程の内容で用意したセミナーであったが、終わったときには一時間過ぎていた。国外の研究室でセミナーを行ったのは今回が始めての機会であったため、終了後はやや安堵した。それと同時に充実した気持ちにもなれた。セミナー後は、学生に個々の研究を簡単に紹介頂いた。また、私からは、セミナーで話せなかつた以前所属した研究室で行った研究の話をさせて頂いた。その後、会議が終わり戻ってきた Fayer 教授と、個別に現在の研究や将来の研究の方向性についての話をさせて頂いた。Fayer 研究室の雰囲気はとにかく活発であることが印象的だった。国外の研究者の研究姿勢に刺激され、私の研究意欲も十分に高まった。

このように有意義な渡航の機会を与えて頂いた本学術領域に感謝を申し上げて、報告を締めくくりたい。



セミナー後、Fayer 研究室のメンバーと記念撮影



Fayer 教授と記念撮影



TRVS 2015 参加および研究室訪問報告

井上 賢一（理研・A02 計画研究協力者）

本新学術領域の若手研究者派遣の支援を受けて、アメリカ・ウィスコンシン大学マディソン校で開催された Seventeenth International Conference of Time Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS 2015)への参加と学会後の研究室訪問(シカゴ大学・Tokmakoff 教授、ミシガン大学・Kubarych 教授)をする機会を頂いたので報告する。

まず、平成 27 年 6 月 21 日～26 日に開催された TRVS 2015 に参加した。TRVS は赤外分光法・ラマン分光法・和周波発生分光法などの時間分解振動分光法を用いた研究に関する国際学会である。1982 年に始まった TRVS は今回で 17 回目を数え、今回は約 250 名が参加して行われた。その中でも、2 次元赤外分光法(2D IR)を用いた研究の発表が数多くあった。2D IR は、筆者が研究課題で用いている界面選択的な振動分光法の 2 次元ヘテロダイイン検出振動和周波発生分光法と直接対応するバルクの分光法であり、非常に参考になる点が多くあった。また、時間分解ヘテロダイイン検出振動和周波発生分光法を用いて明らかになった空気/水界面の超高速ダイナミクスについてポスター発表を行った。特に、我々の研究室はヘテロダイイン検出という先端的な手法を世界に先駆けて開発したということもあり、多くの方に興味を持って足を運んで頂いた。その中で、空気/水界面の超高速ダイナミクスに関してはもちろんのこと、ヘテロダイイン検出の有用性、実用上の技術、さらにはこれからの界面における研究について情報を共有することができた。学会中には、研究室

訪問を予定していた Tokmakoff 教授・Kubarych 教授をはじめとする数多くの研究者と議論することができ非常に有意義な学会参加であった。

続いて、6 月 29 日にシカゴ大学の Tokmakoff 教授の研究室を訪問させて頂いた。ウィスコンシン大学やミシガン大学もそうであったが、アメリカの大学はどこも広大なキャンパスを持ち、自然豊かな美しい中庭があるなど日本の大学とは大きく異なる環境はとても新鮮であった。当日は、Tokmakoff 教授はあいにく不在であったが、学生に丁寧に対応して頂いた。案内してくれた学生は、2D IR を用いてバルクの水を研究対象としており、筆者の界面における水の研究結果を交えながら水の不思議な特性について大いに議論が盛り上がった。

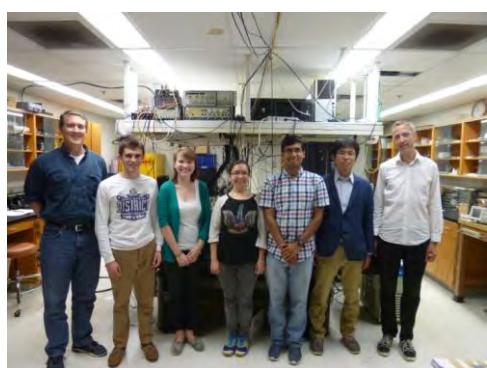
本旅程の最後は、7 月 1 日にミシガン大学の Kubarych 教授の研究室を訪問した。Kubarych 教授も 2D IR を用いた研究を行っている著名な研究者である。特に、非常に考え込まれた完成度の高い光学系や装置はとても刺激的であった。また、ここでは筆者の最近の研究成果についてセミナーを行う機会を頂いた。質疑応答では、筆者と異なる視点からの考えに触れることできとても貴重な機会であった。

今回の海外出張を通して、自身の研究の世界的な立ち位置を再確認するとともに、もっとサイエンスを楽しもうという思いを強くすることができた。

最後に、学会参加・研究室訪問に当たって旅費を支援して頂いた本新学術領域に深く感謝申し上げます。



シカゴ大学の美しい中庭



ミシガン大学にて Kubarych 教授とその学生と