



## 第 5 回全体合宿会議 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第 5 回全体合宿会議が、平成 28 年 5 月 30 日（月）から 6 月 1 日（水）の日程で、あてま高原リゾート ホテルベルナティオ（新潟県十日町市）で開催された。全体合宿会議は公開シンポジウムと並び本新学術領域が毎年開催する重要行事である。その狙いは全メンバーに徹底的に討論する場を提供し、柔らかな分子系に関する共同研究を促進することである。特に本領域は理論、計測、生化学、合成化学など普段まったく異なる学会に出席しているメンバーが集まっており、お互いの話す内容を十分理解するためにには雑用から隔離され、リラックスした雰囲気で本音を話せる環境が必須である。会場のホテルベルナティオは新幹線の最寄り駅・越後湯沢から 1 時間弱バスで移動を要する隔離された場所であり、しかもホテルの敷地が東京ドーム 109 個分と広大で日本離れした環境とあって合宿には最適の場所であった。今回は中間評価終了後、新たな公募班メンバーも加わって行う最初の会議であり、分担者や大学院生などにも参加を呼びかけたところ、なんと 116 名の方が参加し、大変賑やかな合宿となった。

最初に、田原太平領域代表から、新学術領域研究の狙いと、領域全体としてどのような研究を目指すのかが説明された。特に分子の柔らかさと機能の関係について、大きな自由度を有する分子系が多極小ポテンシャル面で状況に応じて最適な構造に変わり機能を発揮する、という本領域が現在までの研究で到達した「柔らかな分子」に対する統一的な理解が示された点で印象的であり、新たに加わった公募班メンバーにもこのコンセプトがよく浸透したのではないかと思われる。このコンセプトに引き続き、従来の研究分野を超えた共同研究の例や、ダイナミックな包摶といった新たな現象が紹介された。また、中間評価で評価 A を獲得したことが報告されたが、「柔らかな分子系」という学理を確立して終了評価ではさらに上を目指そうという勢いで会場が大いに盛り上がった。田原代表の領域概要の紹介を受け、領域全体にかかわる内容のうち、アウトリーチは北尾 A01 班長、ニュースレターは水谷 A02 班長、そして昨年度から開始した国際活動支援班と共同研究は神取 A03 班長が紹介した。特に共同研究につ



いては神取 A03 班長が「5 年後にこれまでの延長線の研究成果であれば、それは認めんぞ！」という評価委員・渡辺芳人先生のお言葉を引用し、基盤研究的 (= 個人研究) ではなく、領域研究的 (= 共同研究) な素晴らしい成果を出して、渡辺芳人先生を驚かせよう、と檄を飛ばした。また、これに引き続き A01 から A03 班の研究の狙い、現状と展望が紹介されたが、これらも田原代表の「柔らかな分子系」のコンセプトに沿つたもので、A01 解析班は多極小ポテンシャルを渡り歩いて機能を発揮する柔らかな分子に対し、理論計算はこの柔らかさを制御する因子、すなわち機能原理を解明するという役割が述べられた。また、A02 計測班は柔らかな分子系の機能解明に対し、計測が狙う方向性を 1) 複数の準安定状態の計測、2) 外部振動に対する応答の計測、3) 複数の部位間の運動性の計測、4) 構造変化 ⇌ 機能活性 相関の計測と整理し、状況に応じて形を変えて機能を発揮する柔らかな分子系に特有の計測が示された。A03 創成班は複雑分子系の柔らかさ、





すなわち構造変化のダイナミクスを A01 解析班、A02 計測班と連携して理解することにより、従来セレンディピティで探索されてきた複雑分子系を用いて戦略的に機能を創成することが可能であり、A03 創成班が共同研究の核になることを成果とともに紹介された。

領域全体、各班の紹介に引き続き、A01 班の新公募班メンバーより研究構想が紹介され、活発な討論が続いた。初日はこの後にポスター発表のショートプレゼンテーションを行い、夕食と若干の休憩後、本領域の名物になりつつあるポスターセッションが行われた。プログラム上、ポスターセッションは 20 時半から 23 時となっているが、議論が白熱して日をまたぐことも珍しく無い。今回は同じ会場に全てのポスターを設置できたので議論も行いやすく、初日から大変な盛り上がりであった。

2 日目は A02 班の新公募班メンバー、3 日目は A02 班の新公募班メンバーより研究構想が講演され、大いに議論を呼んだ。特に、柔らかさの重要性に関する議論が全体を通じて何度も議論になり、領域構想が新メンバー含めて浸透していることが実感された。また、2 日目には領域内共同研究の中でも特筆する成果を上げた研究が 3 件発表されたが、神取班長の発案で共同研究に関係したメンバー全員を登壇させてそれぞれの役割、成果を有機的に結びつけて発表された。いずれの内容も素晴らしいもので、従来に無い組み合わせの共同研究を本領域が結びつけていくことの重要性とその強力さを実感させられた。共同研究発表を討論した



2 日目の午後は自由討論時間となったが、広大なホテルの中でそれぞれ想い想いの場所で集い、リラックスした雰囲気の中で討論に花が咲いていた。これを受けたポスターセッションが初日以上に盛り上がったのは言うまでも無い。3 日目の最後に全体会議でまとめを行い、次の全体行事である公開シンポジウムでの再会とさらなる発展を期して全員バスに乗り込んだ。

本シンポジウムの開催にあたっては新潟県よりコンベンション開催費補助金を頂戴し、学生諸君への旅費補助の一部として活用させていただいた。ここに深く感謝申し上げる。また、本会議開催に多大なご配慮いただいたボテルベルナティオの皆さん、シンポジウムの準備運営に尽力していただいた事務局員・河内美代子さん、松岡園美さん、ならびに運営、進行を円滑に進めてくれた東工大藤井研究室のスタッフ、大学院生の諸君に深く感謝申し上げる。





## 業績紹介：ゆらぎの enhancement を利用したエネルギー測定

林 久美子（東北大・A01 公募研究代表者）

角田 聰（名工大・A03 連携研究者）

論文題目："Giant enhancement of fluctuation in small biological systems under external fields"

著者 : Kumiko Hayashi, Shin Hasegawa and Satoshi P. Tsunoda

雑誌巻号 : *J. Stat. Mech.*, 054028 (2016).

昨年度、UPON (Unsolved Problem on Noise and Fluctuation)に関する第 7 回国際シンポジウムがスペイン・バルセロナ開催された。新領域の若手海外派遣制度で渡欧し、口頭発表を行なった。その会議の特集号を *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* で出すにあたり、私たちも上記の論文を寄稿した。

2015 年のニュースレターでも報告したが、拡散の Giant Enhancement という非平衡現象（文献 1）を回転タンパク質モーター  $F_1$ -ATPase の 1 分子実験で初観測し、私たちの研究結果が *Phys Rev Lett* に掲載された（文献 2）。回転電場系を利用して、 $F_1$  に外部トルクを印加し、 $F_1$  の回転拡散係数を測定した。回転拡散係数は、外部トルクが回転ポテンシャルの深さと拮抗する際にゆらぎが最も増幅され、最大値を取る。この共鳴現象を利用し、回転ポテンシャルの深さが測定できる。（最近、品川・佐々木ら（東北大）が理論計算によってこの測定法の拡張を行った（文献 3）。*J Phys Soc Jpn* (2016) Editor's Choise に選出。）1 分子実験のあたらしいエネルギー測定法として注目されている。

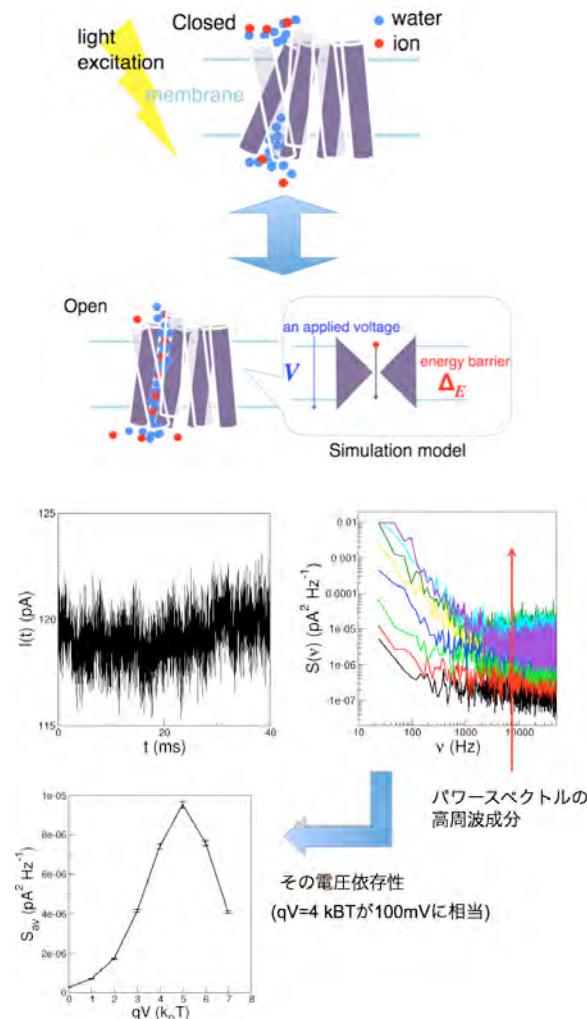
次に、ゆらぎは様々な生体分子の系で観察される普遍的な現象なので、 $F_1$ -ATPase 以外にも拡散の Giant Enhancement の応用先があるのでないかと考えた。 $F_1$  と異なる生体分子として、イオンチャネルを考えた。 $F_1$  の回転運動のゆらぎに対して、イオンチャネルの場合、チャネルを通過するイオン流ゆらぎに注目した。

連携研究者の角田先生との議論で、チャネルロドブシン 2 をモデルにし、ゆらぎの Giant Enhancement のシミュレーションを行なった。光励起された条件下で定

常イオン流を計算した（下図）。パワースペクトルの高周波成分について、電圧依存性を計算すると、ゆらぎの Giant Enhancement が観察できる。このシミュレーション結果より、ゆらぎの Giant Enhancement はイオンがチャネルを通過する際のエネルギーバリアに相当することが予想される。

### 引用文献

- [1] P. Reimann *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **87** 010602 (2002).
- [2] R. Hayashi, K. Sasaki *et al.*, K. Hayashi\*, *Phys. Rev. Lett.* **114** 248101 (2015).
- [3] R. Shinagawa and K. Sasaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85** 064004 (2016).





## 業績紹介：サーモフィリックロドプシン (TR) の X 線結晶構造 -高安定性と光遺伝学的機能の考察-

林 重彦（京都大・A01 計画研究代表者）  
須藤 雄気（岡山大・A02 計画研究分担者）

論文題目："X-ray Crystallographic Structure of Thermophilic Rhodopsin: Implications for High Thermal Stability and Optogenetic Function"

著者：Takashi Tsukamoto, Kenji Mizutani, Taisuke Hasegawa, Megumi Takahashi, Naoya Honda, Naoki Hashimoto, Kazumi Shimono, Keitaro Yamashita, Masaki Yamamoto, Seiji Miyauchi, Shin Takagi, Shigehiko Hayashi, \*Takeshi Murata and \*Yuki Sudo

雑誌巻号：*J. Biol. Chem.* **291**, 12223-12232 (2016).

「ロドプシン」は、情報変換やエネルギー産生を司る光受容タンパク質である。広範な生物が持つものの、高温環境にすむ生物には存在しないと考えられてきた。その理由は発色団レチナールが高温で分解してしまうためである。近年、ロドプシンは生物学的な興味に加えて、光で生命現象を操作する技術である光遺伝学（オプトジェネティクス）のツールとしても注目されている。須藤は、ロドプシンの生物学的機能の解明や光遺伝学への応用を見据え、好熱性生物由来のロドプシンを長年探し求めてきた。それは、好熱性生物のタンパク質は一般に安定であるためである。研究では、「無い」ことを証明することはほとんど不可能であるものの、「有る」ことの証明はたやすい。その観点から、2013 年に米国の国立公園内の温泉にすむ好熱菌からロドプシンを発見し、サーモフィリックロドプシン (TR) と名付けた [1]。また、生化学的手法を用いて、温度依存的な構造変化を明らかにした [2]。

本研究では、TR の三次元構造を 2.8Å 分解能で明らかにし、変異体実験、分子動力学計算、光神経抑制解析など、様々な観点から TR の性質を検討した。その結果、TR が他のロドプシンより遙かに熱に対して安定であること（図上段）、光遺伝学において最も神經抑制活性が高いとされる AR3 に匹敵する活性を示すこと（図中段）、実験結果と理論的考察を融合し、高い安定性の原因を原子レベルで明らかにすること（図下段）、などに成功した。構造解析には、大量かつ高純度の試料と、均質な結晶が必要である。本研究では、試料調製法を再検討し、良質な結晶を得るために条件検

討を数多く行うことで、立体構造決定を達成した。

これまでの光遺伝学におけるロドプシンの利用では、様々なロドプシンを網羅的に調べ、利用可能かどうかを判定するトップダウン型研究が主であった。本研究は、安定なロドプシンの探索と発見を基盤に、光遺伝学への適用を行う「ボトムアップ型の研究」という点で独創的であると自負している。このような研究は、時間がかかる反面、一旦基礎が築ければ、その後は、分子を合理的かつ自在に改変することができる。今後は、分子特性の解析を、本新学術領域の A02 計測班との共同研究で進めるとともに、TR を錫型に、不安定で研究の難しい膜タンパク質を安定化する技術の開発を A01 解析班と共同で行う。また、TR の改変体を用いた脳神経回路解析への利用を A03 創成班と共同で行いたい。【\*本成果は、2016 年 6 月 3 日号の科学新聞に取り上げられました】

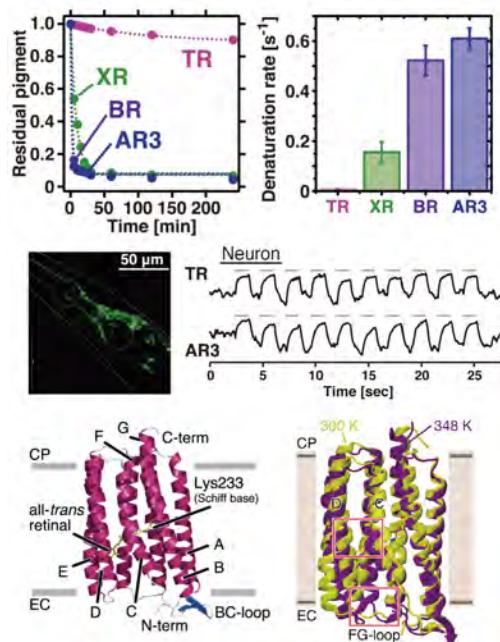


図 本研究の成果（上段：高い熱安定性、中段：高い光神經抑制活性、下段：構造決定と分子動力学計算）

### 引用文献

- [1] T. Tsukamoto, et al., *J. Biol. Chem.* **288**, 21581 (2013).
- [2] T. Tsukamoto, et al., *J. Phys. Chem. B* **118**, 12383 (2014).



## 業績紹介：2本足のタンパク質分子モーター－キネシンが歩く様子を精細に可視化

飯野 亮太

(岡崎統合バイオ・分子研・A02 公募研究代表者)

論文題目："Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1"

著者：Hirosi Isojima, Ryota Iino, Yamato Niitani, Hiroyuki Noji, Michio Tomishige

雑誌巻号：Nature Chemical Biology 12, 290-297 (2016)

DOI: 10.1038/nchembio.2028

キネシンは2本足のタンパク質分子モーターで、細胞骨格である微小管に沿って歩き物質を運ぶ（専門的には足でなく「頭」が正しいのだが説明の便宜上、足と呼ぶ）。2本足のキネシンは人間のように歩くのか？キネシンの大きさはナノサイズでメートルサイズの人間の1億分の1程度しかない。キネシンの質量はとても小さく慣性は働かないで、浮かせた足を勢いに任せて前に着地させることはできない。さらにキネシンは水中で歩くので、熱運動する周囲の水分子がものすごいスピードであちこちからぶつかってくる。この水の衝突で浮いた足はブラブラとブラウン運動すると考えられ、キネシンが歩く仕組みは人間が歩く仕組みとは大きく異なると予想される。しかしながら従来の1分子計測は、時間分解能がミリ秒の蛍光計測であるか、時間分解能がマイクロ秒でも光ピンセットを使って自由な動きを制限した計測であり、キネシンがどのように歩くのかは明らかでなかった。

我々は直径 40 nm の金ナノ粒子をプローブとしてキネシンの片足に結合させ、その動きを可視化することに成功した（図 1 左）。40 nm 位の大きさであれば、つける場所をきちんと選べばキネシンの本来の動きを邪魔しない点が重要なポイントである。金ナノ粒子は高いシグナル／ノイズ比の散乱像が得られ、時間分解能 55 μs、位置決定精度 1 nm での 1 分子計測が達成された。計測の結果、微小管に結合した状態と浮いた状態の足を明確に識別できた。予想通り、浮いた足はブラウン運動でブラブラと揺らいでいた（図 2）。他方、予想外なことに、揺らぎは前後左右に等方的ではなく進行方向に対し右側に偏っていた。これは我々の高時空間分解能計測で初めてみえた新しい発見である。この右側への偏りは、キネシンの両足を繋ぐ「脚」（ネックリンク）の位置を考えると説明ができる（図 1 右）、浮

いた足の動きは微小管に結合した足の構造を反映していることが明らかとなった。浮いた状態が持続する時間の ATP 濃度依存性から、片足が浮いた状態で起こる化学反応素過程（微小管に結合した足への ATP の結合、浮いた足からの反応生成物 ADP の解離等）の速度定数を定量的に求めることができた。また、両足を繋ぐ脚を 1.5 倍（アミノ酸残基 7 個分）長くするとまっすぐ歩けずに、後ずさりや左右にふらふらする酔っ払いのような千鳥足になった（図 3）。さらに脚をアミノ酸残基 1 個分だけ短くすると、足が前になかなか着地できなくなってしまって浮いた時間が長くなり鈍足になることが明らかとなった。これらの結果は、一方向に速く歩くには脚の長さが重要であることを示しており、脚の長さは進化の過程で最適化されていることが示唆された。

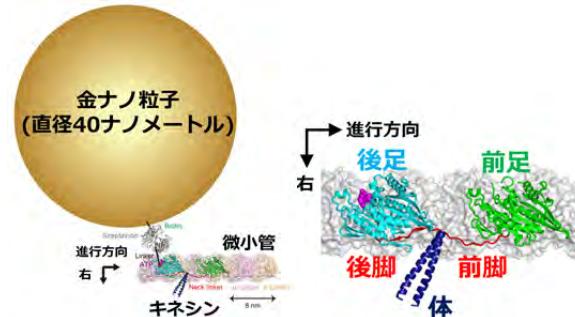


図 1. (左) 実験の模式図. (右) キネシンの構造.

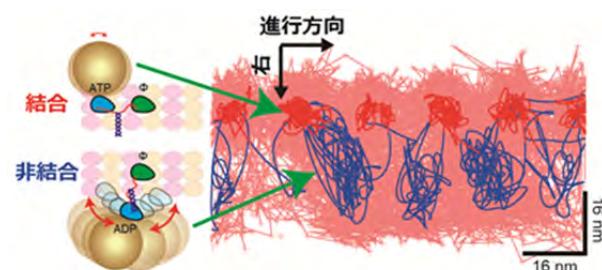


図 2. 時間分解能 55 μs でみたキネシンの足の動き.

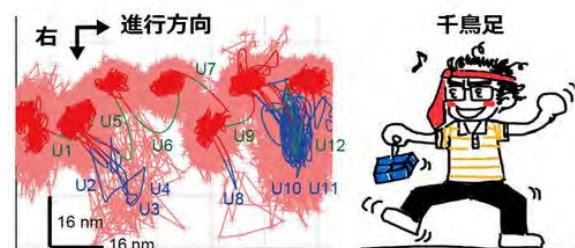


図 3. 両足をつなぐリンクを人工的に伸ばしたキネシンの足の動き

業績紹介：有限  $\pi$ -スタッキングによる高蛍光性固体の作製

関口 翔也（東工大化生研・大学院生）  
吉沢 道人（東工大化生研・A03 計画研究 分担者）

論文題目："Engineering Stacks of V-Shaped Polyaromatic Compounds with Alkyl Chains for Enhanced Emissions in the Solid State"

著者 : Shoya Sekiguchi, Kei Kondo, Yoshihisa Sei, Munetaka Akita, and Michito Yoshizawa\*

雑誌巻号 : *Angew. Chem. Int. Ed.*, **55**, 6906–6910 (2016).

アントラセンなどの多環芳香族分子は、高い蛍光性を有することから、様々な構造体のビルディングブロックに利用されている。しかしながら、固体状態では  $\pi$ -スタッキングにより無限に積層するため、その蛍光性能は顕著に低下する。そこで我々は、高い固体蛍光を示す多環芳香族分子の開発を目指して、アントラセン 2 量体<sup>[1,2]</sup>とアルキル基を組み合わせた V 型分子 1 を新規に設計した（図 1）。今回、この分子が固体状態で有限  $\pi$ -スタッキングによる強蛍光および色素分子の添加による多色蛍光を示したので報告する。

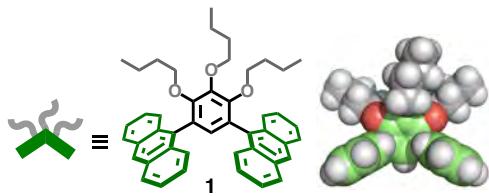


図 1. 側面にアルキル基を有する V 型アントラセン 2 量体 1 よりその最適化構造。

アントラセン環を含む V 型分子 1 は、用いる溶媒により 2 種類の蛍光性固体を与えた。 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  溶液から得られた淡黄色の固体 *mono*-1 は、481 nm に極大値を持つ強い蛍光を示した（蛍光量子収率  $\Phi_F = 72\%$ ；図 1a, b）。一方、 $\text{CH}_3\text{OH}$  溶液からは無色の固体 *ortho*-1 が得られ、425 nm に極大値を持つ中程度の蛍光を示した ( $\Phi_F = 32\%$ )。単結晶および粉末 X 線解析から、固体 *mono*-1 では 2 分子の 1 が head-to-head 型に配列したパッキング構造をとり、アントラセン環同士が部分的にスタッキングしていることが明らかになった。この有限に  $\pi$ -スタッキングしたアントラセン環に起因して、長波長シフトした強い蛍光が観測された。これに対して、固体 *ortho*-1 では 1 が head-to-tail 型に配列し、アントラセン環同士のスタッキングは見られなかった。これにより、固体状態でもモノマー似の蛍光が観測された。

また、固体 *ortho*-1 は加熱 (110 °C) により *mono*-1 に相転移した。さらに加熱 (140 °C) することで、アモルファス状態に変化した。すなわち、1 は外部刺激により 3 つの異なる固体状態を示した。

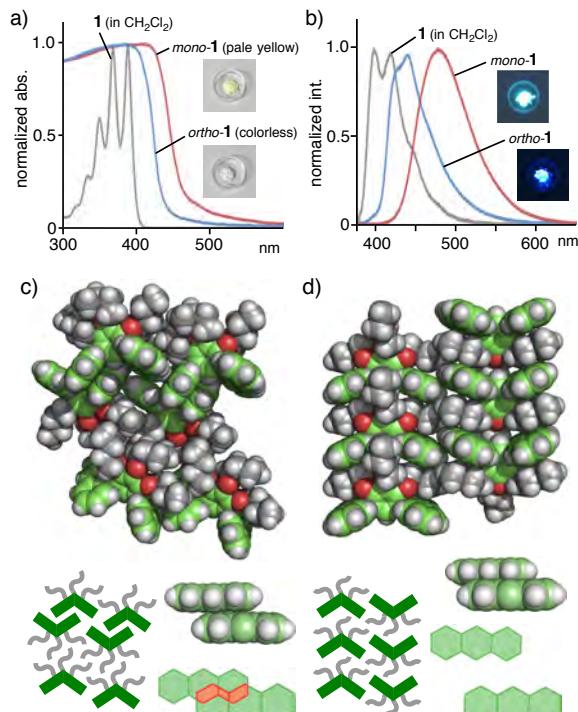


図 2. 固体 *mono*-1 より *ortho*-1 の a) 吸収および b) 蛍光スペクトル ( $\lambda_{\text{ex}} = 368 \text{ nm}$ , 室温)。c) *mono*-1 より d) *ortho*-1 の結晶構造およびその模式図。

さらに、固体 1 に少量の蛍光性色素分子 (1–2 mol% : 図 3a) を添加することで、励起波長を変えることなく、固体蛍光色を大きく変化させることに成功した ( $\Phi_F = 35\text{--}74\%$  : 図 3b)。この蛍光挙動は、アントラセン環から色素分子への効率的なエネルギー移動に由来する。

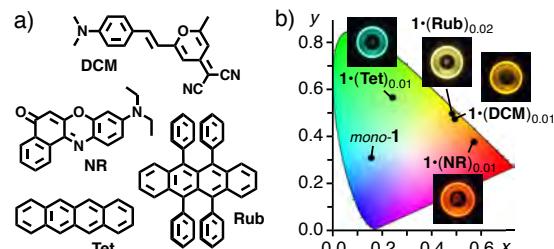


図 3. a) 蛍光性色素分子および b) それらと 1 の混合固体の蛍光性能 ( $\lambda_{\text{ex}} = 368 \text{ nm}$ , 室温)。

参考文献 : [1] K. Kondo, M. Yoshizawa et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, 2308–2312 (2013); [2] K. Kondo, M. Yoshizawa et al., *Chem. Eur. J.*, **22**, 1937–1940 (2016).



## 業績紹介：アミド窒素原子のピラミッド化の方向は水素結合によって決まる

尾谷 優子（東大院薬・A03 公募研究代表者）

論文題目："Hydrogen Bonding to Carbonyl Oxygen of Nitrogen-Pyramidalized Amide - Detection of Pyramidalization Direction Preference by Vibrational Circular Dichroism Spectroscopy."

著者：Siyuan Wang, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, Masatoshi Kawahata, Kentaro Yamaguchi, Yuko Otani\* and Tomohiko Ohwada\*

雑誌巻号：*Chem. Commun.* **52**, 4018-4021 (2016).

タンパク質やペプチドを形作る重要な結合であるアミド結合の非平面化、すなわち窒素原子のピラミッド化が、タンパク質の構造化に寄与している可能性が古くから現在まで議論されている[1]。タンパク質やペプチドのアミド結合は平面構造が優勢であり窒素原子は  $sp^2$  性を帶びているため、通常ピラミッド化の度合いは非常に小さい。しかし、非平面化したアミドが構造変化の過程に寄与する可能性は十分にあり得る。

大きく非平面化したアミド構造を持つ合成化合物が報告されているが、アミド結合が加水分解されやすいなど化学的に不安定なものが多い。以前われわれは、基底状態で顕著に窒素ピラミッド化した構造を誘起する安定な骨格として、二環性の 7-アザビシクロ [2.2.1] ヘプタンアミドの構造特性を報告した。さらに、本骨格をもつプロリン型の  $\beta$ -アミノ酸を合成し、これを連結させたオリゴマーが天然にないヘリックス構造を取ることを示した [2]。今回私達は、このアミノ酸オリゴマーを窒素原子が明確にピラミッド化したペプチドのモデルとして捉え、そのピラミッド化の方向が、鎖内の水素結合で反転することを明らかにした。

溶液中で非平面アミドは窒素の反転により構造の速い変換が起こり、2つの構造は平衡状態にある(図 a)。プロリン型  $\beta$ -アミノ酸の2つの環の連結部分(橋頭位)の側鎖にメトキシメチル基 (-CH<sub>2</sub>OMe)、または水素結合に関与しうるヒドロキシメチル基 (-CH<sub>2</sub>OH) を持つ短い(2-3 残基)オリゴペプチドをそれぞれ合成し、X 線結晶構造解析を行ったところ、意外なことにアミド構造に違いが見られた：前者は *anti* 窒素ピラミッド化構造、すなわちアミドのカルボニル基が C 末端のエステル基と反対側に傾いた構造を取り、後者は *syn* 窒素ピラミッド化構造、すなわちアミドが C 末端エステ

ルと同じ側に傾いた構造を取っていた。また後者では分子内水素結合が見られた(図 b, c)。

核磁気共鳴分光法 (NMR) および赤外円二色性分光法 (VCD、北海道大学の門出教授、谷口助教との共同研究) により溶液構造を調査したところ、有機溶媒中で分子内水素結合が確かめられた。さらに VCD により、非水素結合性オリゴマーでは *anti* 窒素ピラミッド化構造が優勢であり、水素結合性側鎖を持つオリゴマーの場合は *syn* 窒素ピラミッド化構造が優勢であるという結晶と同様の傾向を示し、アミド基と側鎖の水素結合が窒素ピラミッド化の方向を制御することを初めて明らかにした。

アミド窒素のピラミッド化という分子の「柔らかさ」は、たった1つの水素結合で剛直性を帯びることを本研究は示唆しており、タンパク質の構造変化や構造構築における分子構造の「柔らかさ」が、規則性や剛直性を作り出す際、協同的に働く可能性を示唆している点で重要な知見であると考えられる。

様々な角度から議論をして下さった班員の皆様に感謝いたします。

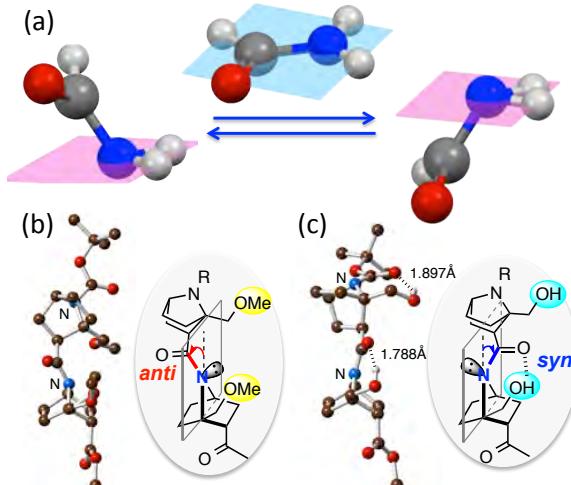


図 (a) 窒素原子の反転による非平面アミドの構造変化。  
(b) 非水素結合性側鎖および(c) 水素結合性側鎖を持つ2量体ペプチドの結晶構造。

## 引用文献

- [1] A. Romanelli, et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **101**, 6397–6402 (2004).  
[2] S. Wang, Y. Otani, et al. *J. Org. Chem.* **79**, 5287–5300 (2014).



## 第 16 回ワークショップ「和周波分光の進展」開催報告

森田 明弘（東北大院理・A01 計画研究代表者）

第 16 回ワークショップ「和周波発生分光の進展」が SFG 研究会との共催で 2016 年 6 月 10 日から 11 日に 東工大大岡山キャンパスにて行われました。界面の和周波発生(SFG)分光は柔らかな界面を分光的に観測できる有力な手法で、本領域でも中心的なテーマの一つです。SFG 分光に関わる研究者の広がりはかなり広く、基礎的な物理化学から材料科学や生物化学まで多岐にわたります。そのため共通の計測手法をテーマとして、SFG に関する研究者が日頃所属する学会分野を超えて交流する機会として開催されました。参加者は 53 名で、本領域からは田原代表をはじめとして、A02 班の石橋教授、奥野博士、山口教授、二本柳博士や A01 班の石山准教授、森田などが参加しました。今回のワークショップでは国内の研究者にとどまらず、中国復旦大学の Chuanshan Tian 教授と韓国西江大学校の Doseok Kim 教授を招聘し、英語による国際的な研究集会として開催されました。

特別講演の Tian 教授は、帯電した固体表面に接した水溶液の  $\chi^{(3)}$  効果を実験で明らかにする成果を発表されました。また Kim 教授は Langmuir 膜への水溶液中のイオンの吸着挙動と構造の詳細を解明されました。

1 日目の埼玉大の山口氏の講演では、水表面のヘテロダイイン(HD)測定で OH 振動の低波数領域と free OH 振動の同定にはほぼ決着をつける成果を与えました。理研の二本柳氏は、2D-HD-SFG の最新の進展を紹介し、脂質膜の帶電符号で水のダイナミックスが顕著に異なることを示されました。富山大の石山氏は、脂質膜 - 水界面および 2D-HD-SFG の理論計算を発表され、実験計測の意味を詳細に明らかにされました。京都大の杉本氏は金属基板上の氷表面の HD 測定で、強誘電 - 常誘電の転移挙動を明らかにされました。物材機構の野口氏は、電極基板上の吸着分子を電子 - 振動 2 重共鳴で測定する成果を発表されました。九州大の田中氏は固体基板上の高分子表面の緩和挙動に SFG で迫る応用を講演されました。産総研の宮前氏は高分子材料でラミネートした表面の接着を SFG で評価しました。

2 日目には東北大の王氏は SFG の理論計算を有機分子界面に展開する研究を報告されました。筑波大の石橋氏はキラル系について HD 計測の SFG での起源に迫る解析を紹介されました。北大の叶氏は脂質膜の

融解挙動やオゾン酸化の様子を SFG で明らかにする成果を示されました。東北大の水上氏は固液界面の表面力計測と SFG 測定を組み合わせて、界面に吸着した液体の長距離引力を明らかにされました。北大の八木氏は燃料電池にかかる Pt 表面上の高分子材料の構造評価への応用を紹介されました。北陸先端大の Hien 氏は Si(111)表面上の水素脱離を SFG と SHG で観測して速度論を明らかにされました。東工大の大内氏はイオン液体の界面構造の分子論的詳細を SFG で明らかにされる研究の展開を講演されました。

そのほかにポスター発表も 13 件なされ、学生のポスター賞は京大の大槻氏（氷表面）、東工大の大橋氏、三輪氏（イオン液体）の研究に贈られました。

この研究会の前身は、SFG に関する研究者の交流の機会としてほぼ隔年で開かれてきました。今回は 7 回目に当たり、東工大の大内教授の協力で東工大で開かれました。回を重ねるごとに発展を見せ、今回の研究会は日本における界面分光の研究者の充実と広がりを反映したものとなりました。日本の学会でも海外の先端的な研究と全く互角なレベルの研究、あるいは国際的にリードする研究が活発に行われていることを改めて確認しました。中国や韓国でも分野が育ちつつあり、その代表的な研究者を招待したこと大きな意義があったと思いました。今後分野の枠を超えるのみならず、国の枠を超えて界面分光の研究をリードすることが十分に期待されます。



(上)全体写真、(左下)Tian 教授、(右下)Kim 教授



## テルライド・ワークショップ “Nonlinear Optics at Interfaces” 参加報告

森田 明弘 (東北大院理、A01 計画班代表者)

Telluride Science Research Conference “Nonlinear Optics at Interfaces” が 2016 年 6 月 21 日から 26 日まで米国コロラド州テルライドで行われた。このワークショップは Alex Benderskii と Franz Geiger の 2 人の世話人によって始められ、界面非線形分光の研究者が 2 年ごとに集まって最新の研究成果を交換しあうもので、今回が第 5 回目にあたる。全体で参加者は 29 人で、日本からは田原太平領域代表と森田の 2 人が参加した。森田は 2008 年の第 1 回目から、また田原代表も第 2 回目から欠かさず参加しており、界面分光の最新の動向をまとめて把握できる貴重な機会となっている。

最初に界面分光の重鎮であるコロンビア大の Ken Eisenthal による帶電した固液界面での  $\chi^{(3)}$  効果の講演から始まって、SFG の高分解能分光 (Hongfei Wang)、シリカ表面の溶液構造 (Dennis Hore, Eric Borguet, Eric Tyrode, Julie Gibbs-Davis, Franz Geiger)、SHG や SFG による表面イメージング (Garth Simpson, Steve Baldelli)、immunoassay への応用 (John Conboy)、脂質单分子膜へのイオンの吸着 (Heather Allen, Paul Cremer)、TiO<sub>2</sub>上の吸着と触媒反応 (Zefeng Ren)、電気化学条件での電極界面観測 (Dana Dlott)、有機薄膜トランジスタ界面 (Aaron Massari)、DNA 結合水のキラル構造 (Poul Peterson)、一重項解離 (Sean Roberts)、タンパク質等の SFG モデリング (Victor Batista)、水表面の SFG の理論 (Jim Skinner, Francesco Paesani, Akihiro Morita)、タンパク質の界面構造 (Elsa Yan)、金微粒子のプラズモン散乱 (Luis Haber)、水の変角振動 (Alex Benderskii)、第 2 次高調波散乱 (Sylvie Roke)、水の電気分解 (Kramer Campen)、界面水和電子の時間分解観測 (Tahei Tahara)、固体界面への溶媒の共吸着 (Rob Walker) といった多彩で最先端の研究が次々と紹介された。

上の講演内容をみても、界面非線形分光の応用が非常に広がっていることが改めて感じられる。今回は理論面でも森田を含めて 4 名の講演があり、これまで遅れていた理論的な発展も進んでいることも見て取れる。

このワークショップの特徴としては、前もって講演タイトルもアブストラクトも用意せず、講演の途中か

らがんがんと質問が出て熱い議論が繰り広げられることで、日本ではまず見られないスタイルである。私の講演でも田原さんの講演でも、途中から質問が止まらなくなって、用意してきたスライドの半分ぐらいしか話すことができなかつた。

このように世界トップの参加者が激しい議論を闘わせる中で、日本から参加した田原代表と森田は十二分にその存在感を示したといってよいと思う。田原さんは、時間分解ヘテロダイン SFG によってはじめて明らかになる水表面の水和電子の振る舞いをクリアに描きだし、並み居る研究者達に強い印象を与えた。森田は、田原グループとの共同による水表面の変角振動についての最新の研究を、論文発表に先駆けて紹介した。SFG の変角振動は実は界面よりもバルクを見ていることを明らかにし、この分野の研究者達にショックを与えた。界面分光が本当に界面を見ているのかというのは、分野の潜在的な疑問であったが、それをさらけ出して新たな議論を巻き起こしたといえる。

テルライドの小ぢんまりとした町で、研究会のメンバーが密接に過ごすことになるので、食事中やハイキングなどでも否応なく議論漬けになる機会が多い。界面分光の分野では、理論家はまだ希少価値があるようで、私にも多くの人が議論を持ち掛けてくれることは、個人的には大変ありがたいことであり、田原さんには「森田さんは外国の大教授たちの先生みたいだね」とからかわれてしまった。この機会に得た情報やアイデアを今後の研究のなかに生かしていきたいと思い、改めて本新学術領域の支援に感謝する。



会場（テルライド小学校）前での参加者の記念撮影



## 都立国分寺高等学校 分野別進路講演会 報告

川村 出 (A02 公募 横浜国立大学)

東京都立国分寺高等学校では高大連携プログラムが盛んであり、例年、各大学の研究者が集まり分野別進路講演会を開催し、生徒たちの進路選定に役立てられている。今年は 2016 年 6 月 22 日 (水曜日) に国分寺高校で開催され、この中で、川村が“色を示すタンパク質の不思議”というタイトルで大学での研究内容を高校生に紹介する機会をいただきました。国分寺高校は JST “中高生の科学研究実践活動推進プログラム”的採択機関でもあり、学生自ら課題設定をして力をつける、科学に好奇心をもった意欲的な学生がたくさんおられました。また、それを指導する教員の方々も熱心だったことが印象的であります。

講演では、私の研究室が所属する学科の説明に加えて、色をもつタンパク質の代表としてチューブに用意したロドプシンタンパク質を実際手に取って見てもらい、その美しさを感じもらいました。そしてその基本的な性質とその応用例についてムービーなども用いて紹介し、タンパク質の機能と構造の関係性を一緒に考えました。その中で私が用いている磁気共鳴法 (NMR) を用いたタンパク質の立体構造解析についてもわかりやすく (?) 説明いたしました。磁気共鳴法で決定したアナバナセンサリードプシンの立体構造の座標情報をもとに 3D プリンタで製作したタンパク質モデルを手に取って楽しんでもらいました。また、この講演の中でタンパク質について少しでも触れていただきたいと思い、「柔らかな分子系」のアウトリーチ活動で大活躍している力覚装置(ハプティックデバイス)を用いて、コンピューターでタンパク質の柔らかさを体験していただきました。時間が無く、数名の学生さんしか体験することができませんでしたが、タンパク質の複雑さと興味深い部分を伝えることができたと思っています。

難しい講義だったかもしれません、研究者としての日頃もお話をさせていただきました。今回の講義を聞いてくれた高校生が少しでも生物物理化学をはじめとする学問と高度な研究内容に興味を持ち、次の目標に向かう役に立てたなら幸いです。

最後に、ハプティックデバイスの使用方法を教えてくださいました東京大学 北尾研の竹村和浩博士に感謝申し上げます。



国分寺高校 分野別進路講演会での様子



説明に用いたアナバナセンサリードプシンの  
3D プリンタモデル(左)とハプティックデバイス(右)



## 若手研究者海外派遣プログラム 活動報告

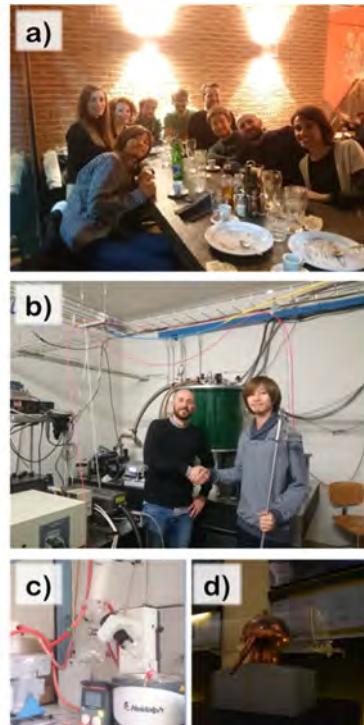
久光 翔太（九大院工・A03 班 楊井グループ・博士後期課程）

2016 年の 3 月 14 日から 3 月 28 日までの間、ミラノビコッカ大学の Monguzzi 教授のもとを訪ね共同研究を行った。長波長領域の光を短波長領域へと変換する技術をフォトン・アップコンバージョン(UC)というが、私は「イオン液体中での三重項励起エネルギー拡散による UC」に関する研究に従事している。Monguzzi 教授は、多彩な分光機器と理論式を駆使して UC の各過程での励起子ダイナミクスの究明を志す、当該分野における世界的権威である。今回の海外派遣で私は、日本で合成した自らのイオン液体を携え、液体中の励起子挙動を明らかにするための詳細な実験を行うために単身イタリアを訪れ、二週間の異国での研究の日々を送ってきた。

液体材料中の励起エネルギーの拡散過程を明らかにすることは非常に難しい。液体材料は、結晶や液晶性の材料の様に分子の配列が明確でない柔らかい材料であるがゆえに、実際に得られたエネルギー拡散の速度・距離などの観測結果を構造情報と関連付けて解釈できないことが研究を難航させる要因の一つである。実際に構造を見ることができない以上、多角的な観測を行い、手探りで液体中の分子が感じている環境を浮き彫りにしていかなければならない。今回の派遣は、そうした背景のもとであり、特に高磁場存在下・極低温環境下における測定得意とする彼の研究室で、私らの所属研究室では不可能な様々な測定を共同研究により行うことを目的とした。

滞在中は、磁場存在下での UC 測定、磁場存在下・低温環境での UC 測定、これらに加えてイオン液体の蛍光寿命の波長分解測定を行った。特に蛍光寿命の測定に関しては当初は予定しておらず、現地で Monguzzi 教授とのディスカッション中に派生的に行なうことが決定したにもかかわらず、非常に強力な結果を得ることができた。現時点では解析中の測定結果もあるが、それぞれの測定から液体中でのエネルギーの失活過程に関する特徴的な挙動が見られてきている。これを詳細に突き詰めることで、機能性のイオン液体材料の科学の発展に大きく貢献できると期待している。

国外の研究室を訪問したのは今回が初めてであったが、測定以外の些細な事柄まで何もかもが新鮮で、刺



a) 研究室メンバーによる歓迎会。b) Monguzzi 教授と装置の前で。c), d) 新旧エバポレーター対決(新：ミラノビコッカ大学、旧：レオナルドダヴィンチ記念国立科学技術博物館)。

激に溢れていた。先生方や学生全員が生き生きとしていて、どことなくのびのびしていた雰囲気であった。一方で研究に対しては非常に真摯な姿勢であり、話し相手が私のような一学生であっても、非常に尊重されている空気を感じた。測定結果に関しても、「君はこれをどう解釈するか」ということをよく尋ねられた。

滞在中困ったことは、研究室にロータリーエバポレーターがなかったこと。近所の有機合成系の研究室を訪ねて、故障している装置を借り、自分たちで直して使わせていただいた。休日に訪れた博物館で、古代のエバポレーター(濃縮器)の模型が展示されているのを見かけて、科学技術の進歩って素晴らしい、と思った。未来の化学者はどのような方法で溶媒を飛ばし、何を明らかにしたいと思っているのだろうか。

最後に、海外派遣プログラムへの採択により今回の訪問を支援していただいたことを深く感謝いたします。特に手続きの関連で名工大 神取研究室の佐々さんには大変お世話になりました。