



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 21

May, 2015

“自然科学カフェ” での はなし：
貫通構造と動的特性がもたらす
分子・材料科学
—輪とひもがつくる新しい分子世界—

高田十志和
(東京工業大学大学院理工学研究科・A01 公募研究代表者)



2月27日(土)、都内で標記の一般市民の勉強会で私どもの研究のことを話す機会を得た。平岡秀一先生のご紹介による、杉安和憲先生に続くもので、これまでも私たちの研究活動を一般の皆様にお伝えすることを行ってきたが、今回は在野の有志(物理系の方)が立ち上げた小さな組織「自然科学カフェ」のご招待ということで気負い無くお引き受けした次第である。もともと、一般の方々に分子の科学を説明するのはたいへん難しいことを承知の上でのことであった。

伝えたかったこと、というか、少しでもよいので理解して頂きたかったことは、紹介する研究の話を通して、(i) 到底役にも立ちそうに無いことをまじめに楽しく研究している研究者がいること、(ii) そうした研究者は「夢で生きている」こと、そして、(iii) その夢はものすごくうまくすると一般の人の夢もかなえるものかも知れないこと、である。サイエンスの話に少なからず興味を持って集まってくくださる人たちなので、なんとか話が通じるのでは・・・と臨んだ次第である。

最初から敬遠されたのでは困るので、難しい研究の話をする前に、身近な話から話すことにした。幸い、低燃費タイヤ用のシランカップリング剤の製造法を開発し、新プラントが建設・稼働していることもあったので、その話から進めて、皆さんの警戒を解くことにした。さすがに皆さん環境問題には関心もあり、また、開発研究そのものも易しかったので、ほとんどの人におおよそのところはご理解頂けたようであった。さてそれからは、ロタキサンという見かけは子供のおもちゃのような「ユニット」を使って、熱力学の話から、高分子の秩序形成に結びつけ理解を得るという至難の課題に挑戦したが、さすがに十分な“感動”を共有することは無理だったようである。化学式は極力避けたつ

もりであるが、質問に対して「科学的に」答えようとすると化学式が必要になるため、かなり困った。

要するにこちらのレベルが低いために、うまく回答できないのである。とはいっても時間は容赦ないので、動画を使ってお茶を濁しつつもとにかく丁寧に伝えることに努めた。途中、マレーシアやベトナムで体験した天然ゴム採取の写真や飛行機のタイヤはすべて天然ゴムでできていること、世界の天然ゴムを取り巻く環境などを話し、身近な話題で一服頂いた。



自己組織化、秩序形成、リニア分子モーターなどおよそ訳のわからない話であったと思うが、出席された皆さんには少しだけ理解して頂けたのではないかと勝手に思っている。また、私たち研究者が一生懸命「夢」に向けて努力していることを理解して頂くことも大切であったが、それも少しは達成できたと思っている。

今回は学習欲というよりも少し高い意識レベルの方々への講演であり、アウトリーチ活動の対象レベルとしては最高級であると感じた。20名足りずの職業も年齢も性別も多様な集団の皆さんに私が最後に申し上げたことは、「自然科学カフェのように知識欲を共有する“リッチ”な集いがあることを知っただけでも大きな収穫でしたが、夜も小難しい議論を延々と楽しむ気さくな方々がたくさんいらっしゃることに感心しました。狭い社会に閉じこもっている人間にはとても新鮮でした。」であった。

最後に、丁寧に最後までお世話頂いた後藤様、古屋様に厚く御礼申し上げる次第である。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 21

May, 2015

日本化学会 特別企画

「生命および人工分子システムにおける動的秩序形成:分子論的理解」を終えて

平岡 秀一

(東京大学大学院総合文化
研究科・A02 計画研究代表)



2015年3月26日午前に日本大学理工学部船橋キャンパスで開催された日本化学会第95春季年会において「生命および人工分子システムにおける動的秩序形成:分子論的理解」と題し特別企画を開催しました。

生命系に見られる高次の分子システムの秩序形成の理解をキーワードに、生命および人工系の自己組織化の研究者6名による講演を下記の内容で行いました。

趣旨説明: 平岡 秀一 (東大院総合文化)

生命分子の自己組織化のダイナミクス

加藤 晃一 (岡崎統合バイオ/分子研)

自己増殖する超分子集合体

杉安 和憲 (物材機構)

再構成型無細胞タンパク質合成で何ができるか?

金森 崇 (ジーンフロンティア(株))

秩序形成の分子理論

佐藤 啓文 (京大院工)

金属錯体型自己組織化のメカニズム

平岡 秀一 (東大院総合文化)

超分子ポリマーの組織化とトポロジー

高田 十志和 (東工大院理)

加藤晃一領域代表からは、生命系の自己組織化の一例としてプロテアソームの組織化についてご紹介しました。生命系の組織化では、人工系とは比べ物にならないほど複雑に構成成分が関与することが説明されました。杉安和憲班員からは、アミロイド形成と似た機構でファイバー形成する人工系について、詳細な機構解明の成果が紹介されました。金森崇様からは企業の立場から、無細胞タンパク質合成系(Pure System)についてわかりやすくご説明頂き、その可能性とさら

に発展させた Pure frex を含め最新の現状をご紹介頂きました。佐藤啓文班員からは自己組織化機構に関する理論的アプローチについてご自身の研究をもとに最近の成果をご紹介頂きました。筆者は最近取り組んでいる金属錯体型の自己組織化の機構を実験的に調べる手法と最近の成果を紹介しました。高田十志和班員からは、輪分子に軸分子が貫通したロタキサン骨格をスイッチング部位として利用した様々な集合体の形成、構造および物性変換をご紹介頂きました。

3月26日は学会初日で、また9時30分から開始にもかかわらず会場には開始前から多くの方々にお集まり頂き、途中からは立ち見も現れる程でした。また、若い参加者が多く、各講演の後には活発な質疑応答が行われました。自己組織化をキーワードに生命系と人工系の研究者が集まり、秩序形成の本質について情報共有する企画はこれまで開催されていなかったこともあり、どれだけ関心を持って頂けるか心配していましたが、講演者と参加者との活発な討論を拝見し、新ためて、この研究領域の担う重要性を実感しました。

末筆となりましたが、本企画をとともに進めていただきました株式会社 豊田中央研究所 梅本和彦様に心より御礼申し上げます。



講演者および企画者(講演終了後に会場にて撮影)



特別企画当日夜に開催した懇親会の様子



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 21

May, 2015

日本化学会第 95 春季年会 (2015)

アジア国際シンポジウム報告

佐藤啓文

(京都大学 工学研究科・A01
計画研究代表者)

岩田耕一

(学習院大学 理学部・A01 公
募研究代表者)



平成 27 年 3 月 26 日-29 日に日本大学理工学部船橋キャンパス／薬学部において開催された日本化学会第 95 春季年会 (2015) の第 2 日目に、標記のアジア国際シンポジウム-物理化学／理論化学・情報化学・計算法学ディビジョン-が開催された。ご案内の通り、日本化学会は会員数約 3 万を擁する大変大きな学会であり、平成 18 年よりディビジョン制度を発足させ、現在 21 のディビジョンが活動している。アジア国際シンポジウムは年会会期中に各ディビジョンが主体となって企画し、毎年数多く開催されている。これは、アジア地区で活躍している概ね 40 歳以下の若手独立研究者数名を Keynote Lecturer として招き、国内からも活躍している若手研究者をお招きして構成するシンポジウムである。多くの若手研究者にとっては、英語での招待講演という絶好の機会であり、いつも活発な議論と交流がなされている。

理論化学・情報化学・計算法学 (TIC) ディビジョンは、昨年度まで中井浩巳主査 (早稲田大学)、鳥居肇幹事 (静岡大学)、後藤仁志幹事 (豊橋技術科学大学)、奥村光隆幹事 (大阪大学) と佐藤啓文班員で幹事会を構成し、毎年この企画を行ってきた。これまでに本領域からも重田育照班友が招待講演をされている (2012 年)。任期満了に伴って、今春からは鳥居主査の新体制下、杉本学先生 (熊本大学) と松林伸幸先生 (大阪大学) を新たに幹事に加えて、このシンポジウムに臨んだ。ま

たこれまで単独開催であったが、今回初の試みとして物理化学ディビジョンとの共同でシンポジウムを開催した。同ディビジョンは、現在岩田耕一班員が主査を務めており、理論から実験の幅広い分野に渡る講演と活発な議論がなされた。朝の 9 時から夕方 5 時 10 分までの間に 5 件のセッションを詰め込んだが、すべてのセッションで理論家と実験家の両方に講演をお願いした。講演やその後の議論を通じて理論と実験の研究者の間での実質的な交流を実現できたと喜んでいる。

Keynote Lectures

(The Hebrew Univ. of Jerusalem) HARRIES, Daniel
(Chulalongkorn Univ.) VCHIRAWONGKWIN, Viwat
(Ulsan National Institute of Science and Technology) KWON, Oh-Hoon
(Nanyang Technological Univ.) SUM, Tze Chien
(Korea Advanced Institute of Science and Technology) JUNG, Yousung

Invited Lectures

(Chulalongkorn Univ.) RUNGRONGMONGKOL, Thanyada
(Nagoya Institute of Technology, JST PRESTO) INOUE, Keiichi
(Univ. of the Ryukyus) HIGASHI, Masahiro
(Gakushuin Univ.) TAKAYA, Tomohisa
(The Univ. of Tokyo) Nakagawa, Keiichi
(The Univ. of Tokyo) ○ YONEHARA, Takehiro;
TAKATSUKA, Kazuo
(Institute for Molecular Science) YAMANE, Hiroyuki
(Institute for Molecular Science) IIDA, Kenji
(ESICB, Kyoto Univ. / MANA, NIMS) SODEYAMA, Keitaro
(Kyoto Univ.) HORIKE, Satoshi



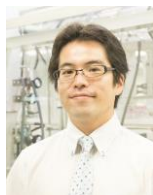
“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 21

May, 2015

受賞報告

佐藤宗太

(東北大学 原子分子材料科学
高等研究機構 (WPI-AIMR)
・A02 計画研究代表者)



2015年4月15日に、「生体分子インターフェースの精密合成に関する研究」に対して、平成27年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞を受賞いたしました。本受賞に関しまして、物構研 (KEK PF) や SPring-8 の web サイトにご紹介いただきました。

受賞に関連した研究は、前任地の東京大学 大学院工学系研究科の藤田誠先生のグループで主に実施させていただいたものであり、東北大学に異動した後も、共同研究として続けさせていただいております。本新学術領域の研究課題にも深く関連した成果であり、大変光栄に思っております。

本研究の基盤となっているのは、藤田グループが研究してきている、自己組織化によって合成された錯体分子です。二カ所に結合部位をもつ折れ曲がった有機分子(L)と、 Pd^{2+} イオンのような平面四配位性の結合様式をもつ遷移金属イオン(M)とを、有機溶媒中に溶かして混合するだけで、自発的な秩序化が進み、球状の錯体分子が得られます。結合の手を余すことなく組み上がるように、錯体分子の組成は M_nL_{2n} であり、さらに、対称性が高い閉じた立体構造が得られるように $n = 6, 12, 24, 30, 60$ に限定されることがわかってきています。この自己組織化においては、ほどよい強さの有機分子-金属イオン間の配位結合を使うことで、可逆的に結合の生成と解離が進行し、収率100%で単一構造の生成物が選択的に得られます。そのため、直径が数ナノメートルを超え、分子量が万の単位に達する、タンパク質にも匹敵する巨大分子を、簡単に調製できるという特徴があります。

私の研究では、この巨大人工分子を化学修飾し、その機能を探索してきました。あらかじめ配位子に化学修飾することで、自己組織化錯体には配位子の位置に、配位子と同じ数だけの官能基をクラスター化させる分子設計が可能になります。有機小分子をクラスター化させると、疎水性やフルオラス性といった小分子に由

来する物性が集積効果によって増強され、疎水性小分子やフルオラス性の小分子を錯体が分子認識できることを見いだしました。

さらに、この人工分子と生体由来分子とのハイブリッド化をめざし、糖鎖やDNA鎖、ペプチド鎖を化学修飾することで、生体分子のインターフェース(構造が分子レベルで定まった界面)を生み出すことに成功しました。生体内においては、このようなインターフェースによる生命現象の発現がよく見受けられますが、人工系でそのモデル分子を精巧につくりだし、高分解能な解析を通じて構造と機能との相関を見いだす検討は例がありませんでした。糖鎖を錯体内面に集積して親水性界面をつくり、タンパク質を丸ごと閉じ込めて安定化させたり、正電荷を帯びたペプチド鎖を錯体表面に集積してDNA鎖をまきとったりする例を示すことができました。今後は本領域での研究を通じ、他に例をみない有機化学と生命分子科学とのハイブリッド分子を活用して、他の手法ではアプローチできない生命現象の解明へとつなげたいと考えています。

最後に、このような栄えある賞をいただいたのは、藤田誠教授をはじめ、藤田研スタッフの皆様、ポスドクや学生の皆様のおかげです。また、錯体化学や有機合成化学といった合成化学の領域にとどまらず、生命分子の領域にもまたがる学際的な研究を展開するにあたって、加藤晃一先生のグループをはじめ、多くの研究者の方々との共同研究を通じて、新しい発想を得て研究成果につなげられました。また、巨大分子システムの人工合成とその構造決定・機能評価のために、国内外の数々の共同利用施設を使わせていただき、それぞれの専門分野の研究者の方々に助けていただきました。改めて、この場を借りて御礼申し上げます。





“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 21

May, 2015

最近の動き

雑誌論文

1. Y. Nakasone, Y. Kawaguchi, S-G. Kong, M. Wada, M. Terazima, “Photo-Induced Oligomerization of Arabidopsis Thaliana Phototropin 2 LOV1”, *J. Phys. Chem. B*, **118**, 14314–14325, (2014), [10.1021/jp509448b](https://doi.org/10.1021/jp509448b)
2. M. Imamura, T. Uchihashi, T. Ando, A. Leifert, U. Simon, A. D. Maly, J. G. Hedderle, “Probing Structural Dynamics of an Artificial Protein Cage Using High-Speed Atomic Force Microscopy”, *Nano Letters* **15**(2), 1331-1335, (2015), [10.1021/nl5045617](https://doi.org/10.1021/nl5045617)
3. S. Sato, R. Takeuchi, M. Yagi-Utsumi, T. Yamaguchi, Y. Yamaguchi, K. Kato, M. Fujita, “Self-Assembled, π -Stacked Complex as a Finely-Tunable Magnetic Aligner for Biomolecular NMR Applications”, *Chem. Comm.*, **51**, 2540-2543, (2015), [10.1039/C4CC09354B](https://doi.org/10.1039/C4CC09354B)
4. T. Matsuno, S. Sato, R. Iizuka, H. Isobe, “Molecular recognition in curved π -systems: Effects of π -lengthening of tubular molecules on structures and thermodynamics”, *Chem. Sci.*, **6**, 909-916, (2014), [10.1039/c4sc02812k](https://doi.org/10.1039/c4sc02812k)
5. Q.-F. Sun, S. Sato, M. Fujita, “ $M_{12}(L^1)_{12}(L^2)_{12}$ Cantellated Tetrahedron: A Case Study for Mixed-Ligand Self-Assembly”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, 13510-13513, (2014), [10.1002/anie.201408652](https://doi.org/10.1002/anie.201408652)
6. S. Enoki, R. Iino, Y. Niitani, Y. Minagawa, M. Tomishige, H. Noji, “High-speed Angle-resolved Imaging of Single Gold Nanorod with Microsecond Temporal Resolution and One-degree Angle Precision”, *Anal. Chem.* **87**, 2079-2086, (2015), [10.1021/ac502408c](https://doi.org/10.1021/ac502408c)
7. Y. Kitago, M. Nagae, Z. Nakata, M. Yagi-Utsumi, S. Takagi-Niidome, E. Mihara, T. Nogi, K. Kato, J. Takagi, “Structural Basis for Amyloidogenic Peptide Recognition by SorLA”, *Nat. Struct. Mol. Biol.*, **22**, 199-206, (2015), [10.1038/nsmb.2954](https://doi.org/10.1038/nsmb.2954)
8. T. Nakamura, H. Matsushita, F. Sugihara, Y. Yoshioka, S. Mizukami, K. Kikuchi, “Activatable ^{19}F MRI Nanoparticle Probes for the Detection of Reducing Environments”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 1007-1010, (2015), [10.1002/anie.201409365](https://doi.org/10.1002/anie.201409365)
9. R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta, “Protein Folding Pathways Extracted by OFLOOD: Outlier FLOODing Method”, *J. Comput. Chem.*, **36**, 97-102, (2015), [10.1002/jcc.23773](https://doi.org/10.1002/jcc.23773)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 21

May, 2015

図書

1. Y. Zhang, T. Yamaguchi, T. Satoh,
M. Yagi-Utsumi, Y. Kamiya, Y. Sakae, Y.
Okamoto, K. Kato, “Conformational
Dynamics of Oligosaccharides Characterized
by Paramagnetism-assisted NMR
Spectroscopy in Conjunction with Molecular
Dynamics Simulation”, Advances in
Experimental Medicine and Biology, 842,
217-230, (2015),
[10.1007/978-3-319-11280-0_14](https://doi.org/10.1007/978-3-319-11280-0_14)

受賞報告

1. 佐藤宗太
2015年4月15日に「生体分子インターフェースの精密合成」に関する研究で平成27年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞を受賞
http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/27/04/1356509.htm