



今井 隆志上級研究員に溶液化学研究会第4回奨励賞

この度、「分子液体論に基づくタンパク質の水和熱力学と分子認識に関する研究」に対して、溶液化学研究会第4回奨励賞を受賞致しました。受賞対象となった研究は、私が総研大の学生るとき分子研において平田先生のご指導の下行った研究を足掛かりにし、その後発展させた研究です。

私が学生の頃（1997年度～2000年度）は、まだタンパク質は複雑すぎて液体論（液体の統計力学。RISM理論など）の対象外でした。理論上の問題だけでなく計算機能力の問題もありました。私が、タンパク質に挑戦したのは、分子研から立命館大学に移ってからのことです。その少し前に、当時平田Gに在籍していたコバレンコさんが3D-RISM理論という有望な理論を開発しました。私は、3D-RISM理論を使ってなんとかタンパク質を解こうとしましたが、これが一筋縄ではいきませんでした。仕込んだ計算が次の日には発散しているという虚しい日々が続きました。当時は、タンパク質のような複雑な系で3D-RISM方程式の解が存在するかどうか自分分かっていませんでしたので、徒労に終わる可能性もあったのですが、それまでに培ってきた“RISMを解く職人技”を駆使しながら粘り強く試行錯誤を続けた結果、ついに最初のタンパク質の計算に成功しました。それを足掛かりに、大学院生るときしなくてはできなかったタンパク質の部分モル体積の問題に取り組み、タンパク質の構造変化に伴う体積変化と水和の関係を明らかにすることができました。さらには、タンパク質の分子認識の問題にも取り組みました。3D-RISM理論を用いれば、タンパク質のどの部分にどのぐらいリガンドが吸着するかを水

和の効果も含めて予測できることを示しました。理研に移ってからは、さらに創薬への応用を目指して、3D-RISM理論に基づく新しいリガンドマッピング法を開発しました。本年の4月からは、神戸ポートアイランドにある計算科学研究機構（京速コンピュータ「京」の設置機関）で研究を行っています。タンパク質の構造変化をリガンドマッピング法に取り入れるなど、今後「京」を最大限活用し方法論をさらに発展させるため奮闘中です。

今回の受賞は、分子研時代の研究をきっかけにし、その後、立命館大学と理研において様々な人に支えられながら行ってきた研究すべてを総合して頂いた賞だと認識しています。平田先生をはじめすべての共同研究者の皆様にご場をお借りして改めて感謝の意を表します。



今井 隆志（いまい・たかし）

2000年3月に総合研究大学院大学数物科学研究科（分子研・平田G）博士後期課程を修了後、分子科学研究所博士研究員、立命館大学総合理工学研究機構博士研究員、立命館大学情報理工学部講師、理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム上級研究員を経て、2011年4月より理化学研究所生命システム研究センター上級研究員。