

# 日本学術振興会アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 01 第2回日韓生体分子科学セミナー(実験とシミュレーション)報告

報告：生命・錯体分子科学研究領域 教授 桑島邦博

2009年12月22-23日の二日間、標記のセミナーが名古屋大学豊田講堂内にあるシンポジウムで開催されました。全部で34件の講演があり、参加者は、日本から19名以上、韓国から16名、中国から1名、米国から1名でした。こぢんまりとしたセミナーでしたが活発な討論があり、皆大変満足できる内容であったと思います。

セミナーの発表内容は、蛋白質のフォールディング、アミロイド形成などに関する分子レベルの実験とシミュレーション、分子モーターなどの蛋白質超分子複合体、蛋白質ネットワーク、電子顕微鏡画像解析、天然変性蛋白質、

神経ネットワークデバイスの開発など多岐にわたりました。

このセミナーは、分子研で行われている日本学術振興会アジア研究教育拠点(アジアコア)事業の活動の一つとして行われたものです。蛋白質を始めとする生体分子の構造形成と機能発現の分子機構に関する研究は、ポスト・ゲノムの重要な研究として位置づけられます。特に、バイオインフォマティクスやシステム生物学などの情報科学を基盤とした新しい研究分野が大きく進展しつつある中で、生体分子の物理化学を基盤とした研究の重要性も今後ますます高まって行くと期待されます。

このような研究を担って行くのは分子科学者、生物物理学者、生化学者などであり、日本の分子科学研究所、韓国のKIAS (Korea Institute for Advanced Study) とKAIST (Korea Advanced Institute of Science and Technology) では、このような生体分子の物理化学に関する研究も盛んに行われています。そこで、これらの研究所が中心となって日韓の共同セミナーを開催し、両国間のこの分野の研究交流を深めることがセミナーの目的でした。

来年度も、2011年2月27日-3月1日の日程で、第3回のセミナーを韓国済州島で開催の予定です。

## 2nd Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences - Experiments and Simulations Symposium Hall, Nagoya University, Nagoya, Japan December 22 (Tue) - 23 (Wed), 2009

### Organizers:

Kunihiro Kuwajima (IMS), Shigetoshi Aono (IMS), Fumio Hirata (IMS),  
Koichi Kato (IMS), Yuko Okamoto (Nagoya University),  
Jooyoung Lee (KIAS) and Hawoong Jeong (KAIST)

### December 22 (Tue)

9:00-9:10 Kunihiro Kuwajima (IMS) Opening

#### Session 1 (Chair: Yuko Okamoto, Nagoya U)

9:10-9:35	Jooyoung Lee (KIAS)	Protein Structure Prediction and Its Biological Applications
9:35-10:00	Ayori Mitsutake (Keio U)	Development of Simulated-Tempering Algorithms for a Multidimensional Version
10:00-10:25	Sun Choi (Ewha Womans U)	Structural and Computational Studies of S-Adenosylhomocysteine Hydrolase and Its Novel Mechanism-Based Inactivators

10:25-10:45 (Coffee Break)

#### Session 2 (Chair: Shigetoshi Aono, IMS)

10:45-11:10	Yuji Furutani (IMS)	Stimulus-Induced Difference FTIR Spectroscopy for Archaeal-Type Rhodopsins
11:10-11:35	Koichiro Ishimori (Hokkaido U)	Protein Dynamics Studied by High Pressure Spectroscopy
11:35-12:00	In-Ho Lee (KIAS/KRISS)	Optimum Action Method for Calculating Protein Folding Pathways

12:00-13:30 (Lunch)

#### Session 3 (Chair: Yuji Furutani, IMS)

13:30-13:55	Hiroshi Fujii (IMS)	$^{13}\text{C}$ and $^{15}\text{N}$ NMR Study of Heme-bound Cyanide in Ferric Heme Peroxidases
13:55-14:20	Yutaka Kuroda (TUAT)	Further Simplification of the BPTI Sequence: Minimum Information for Specifying a Native Protein Structure
14:20-14:35	Jin Chen (IMS)	A Potassium Switch of ATP-Induced GroEL Conformational Changes
14:35-14:50	Takashi Nakamura (IMS)	The Molten Globule State and Its Biological Function in $\alpha$ -Lactalbumin

14:50-15:10 (Coffee Break)

#### Session 4 (Chair: Hiroshi Fujii, IMS)

15:10-15:35	Shigetoshi Aono (IMS)	Reaction Mechanism of Aldoxime Dehydration Revealed by X-ray Crystal Structure of the Michaelis Complex of Aldoxime Dehydratase
15:35-16:00	Shinobu Itoh (Osaka U)	Monooxygenase Activity of Type-3 Copper Proteins
16:00-16:25	Dong Hae Shin (Ewha Womans U)	The Reduced Activity of Nucleoside Diphosphate Kinase-A Through Sequential Conformational Changes Induced by Oxidation
16:25-16:50	Takashi Hayashi (Osaka U)	A Role of Heme-7-Propionate Side Chain in Cytochrome P450cam

16:50-17:10 (Coffee Break)

#### Session 5 (Chair: Hawoong Jeong, KAIST)

17:10-17:35	Hisashi Okumura (IMS)	Multibaric-Multithermal and Partial Multicanonical Molecular Dynamics Simulations of Alanine Dipeptide
17:35-18:00	Chaok Seok (Seoul National U)	Structure Prediction of Potentially Flexible Regions in Template-Based Modeling
18:00-18:25	Fumio Hirata (IMS)	A Statistical Mechanics Study of Molecular Recognition and Drug Design

18:25-19:00 (Break)  
19:00-21:00 (Reception)

**December 23 (Wed)**

**Session 6 (Chair: Jooyoung Lee, KIAS)**

9:00-9:25	Yuko Okamoto T18 (Nagoya U)	Generalized-Ensemble Simulations in Biomolecular Science
9:25-9:50	Hawoong Jeong T19 (KAIST)	Analyzing Protein Complexes: Function and Abundance
9:50-10:15	Luhua Lai T20 (Peking U)	Computational Design of Protein Structure and Function

10:15-10:35 (Coffee Break)

**Session 7 (Chair: Tsuneo Urisu, IMS)**

10:35-11:00	Jinwoo Lee T21 (Kwangwoon U)	A Non-Local De-Noising Method for Electron-Microscopy (EM) Images
11:00-11:25	Tae-Young Yoon T22 (KAIST)	Dynamic Ca <sup>2+</sup> -Dependent Stimulation of Vesicle Fusion by Membrane-Anchored Synaptotagmin1
11:25-11:50	Changbong Hyeon T23 (Chung-Ang U)	Dynamics of Kinesin Motors
11:50-12:05	Koki Makabe T24 (IMS)	Role of the Main-Chain Hydrogen Bonding in $\beta$ -Sheet Register

12:05-13:35 (Lunch)

**Session 8 (Chair: Kunihiro Kuwajima, IMS)**

13:35-14:00	Weontae Lee T25 (Yonsei U)	Structural Biology and Evolution of Telomere Binding Proteins
14:00-14:25	Koichi Kato T26 (IMS)	Structural Basis for the Functional Mechanisms of the Proteins Involved in the Ubiquitin-Proteasome System
14:25-14:50	Bong-Jin Lee T27 (Seoul National U)	Toxin-Antitoxin System of <i>Helicobacter pylori</i>

14:50-15:10 (Coffee Break)

**Session 9 (Chair: Fumio Hirata, IMS)**

15:10-15:35	Seokmin Shin T28 (Seoul National U)	Simulations on Aggregation of Oligomers for Fibril Forming Peptides
15:35-16:00	Shigehiko Hayashi T29 (Kyoto U)	Chemical Reactions and Molecular Dynamics in Functional Processes of Motor and Photoreceptor Proteins
16:00-16:25	Shinji Saito T30 (IMS)	Molecular Simulation of Signal Transduction Protein Ras: Structural Changes and Reaction
16:25-16:50	Sihyun Ham T31 (Sookmyoung Women's U)	Structural and Mechanistic Studies of Amyloidogenic Protein Aggregation

16:50-17:10 (Coffee Break)

**Session 10 (Chair: Koichi Kato, IMS)**

17:10-17:35	Tsuneo Urisu T32 (IMS)	Development of Neural Network Devices as a New Methodology for Physical Chemistry Investigation of Neuroscience and Neurodegenerative Diseases
17:35-18:00	Vladimir N. Uversky T33 (Indiana U)	Intrinsically Disordered Proteins in Human Diseases
18:00-18:25	Kunihiro Kuwajima T34 (IMS)	Hydrogen-Exchange Kinetics of the <i>Escherichia coli</i> Chaperonin Complex

18:25-18:35 Jooyoung Lee (KIAS) Closing



## 02 日本学術振興会アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 China-Japan Joint Symposium on Advanced Organic Chemistry 先端有機化学に関する日中シンポジウム

報告：生命・錯体分子科学研究領域 教授 魚住 泰広

11月28日、29日の両日、中国科学院・上海有機化学研究所(SIOC)において「China-Japan Joint Symposium on Advanced Organic Chemistry (先端有機化学に関する日中シンポジウム)」と題するシンポジウムを開催した。今回は日本側の世話人として魚住(分子研)に加えて京都大学の大江浩一教授にご尽力いただき、中国側はKuiling Ding(SIOC所長)、Shuli You(SIOC教授)両先生をホストとしての開催である。すでに関連のシンポジウムも4回目(年1回、4年目)を迎え、特に前回の北京大学での機能材料・触媒に焦点をあてたシンポジウムの席上で上海での開催が希望されていたこともあり、まさに待望のシンポジウムとなった。

シンポジウム内容としては、日中両

国の口頭研究発表がほぼ半数ずつを占め、相互のインタラクティブな学术交流が持たれた。日本側は主催機関である分子科学研究所に限定せず北海道大学、京都大学、大阪大学、名古屋大学、理化学研究所からも登壇を得、中国側もSIOC, Fudan Univ., East China Normal Univ. Shanghai Institute of Materia Medicaをはじめとし、本領域の気鋭の研究者が登壇した。

日本側からの話題(演題)の多くは遷移金属を利用した錯体合成、触媒反応開発、新規な機能性分子開発が中心となっており、必然的に中国側からもそれに呼応するように関連研究発表が主流であった。SIOCをはじめ近隣の大学等からの聴講参加も多く、20名以上の大学関係者がディスカッションに参加し、それにより本シンポジウム

が一層の緊張感をもって盛り上がった。上海蟹、白酒(55度ほどの強い中国スピリッツ)、カラオケなどなど会場外のアクティビティーも銘々各々盛り上がったようである。翌年に控えた万博効果で町並みの整備も進みつつあり、またかねてより整備済みのリニアモーターカーによる世界最速の空港アクセス路線には初めて乗る日本側参加者も多く、普段は学究の徒である先生方が子供のようにワクワクした横顔を覗かせたことも上海ならではの出来事であった。

懇親の席上では次年度以降地方都市(例えば天津のようなアクセス容易な大学都市)での同様のシンポジウム開催を希望する声も多く聞かれた。

ぜひ前向きに次回への継続を考えたい、成果に富むシンポジウムであった。

## 03 日本学術振興会アジア研究教育拠点事業「物質・光・理論分子科学のフロンティア」 第4回年次会議

報告：光分子科学研究領域 教授 大森 賢治

去る2010年3月1~2日に、台北市の中央研究院原子分子科学研究所において標記研究会が開催された。本研究会は、平成17年度から分子科学研究所(IMS)・中国科学院化学研究所(ICCAS)・韓国科学技術院自然科学部(KAIST)・台湾中央研究院原子分子科学研究所(IAMS)が連携して進めてきた標記事業の一環として開催された。最新の研究成果を議論し親睦を深めるとともに、2009年度の事業活動を総括し今後の展望を議論するのが

主な目的である。

今回は、本事業を強いリーダーシップを以て推進されてきた中村宏樹所長の任期最後の年度を締めくくる年次会議であった。各国からの参加者が会期を通じて中村所長に対して深い感謝の意を表していたのが印象的であった。中村所長もご自身の講演で、アジアの今後の発展に対する期待を熱く語られた。また、その他にも口頭発表やポスター発表で多くの興味深い成果についての非常に活発な議論が展開され

た。ビジネスミーティングにおいては、中国、韓国、台湾の責任者が本事業の発展的な継続を強く望んでいる事がわかった。日本以外のアジア諸国が急速に力をつけてきているとは言え、アジア地域の今後の分子科学の発展において日本が果たすべき責任は依然として大きいようである。

最後に、高橋開人博士、Ching-Ming Wei博士を始めとして、本会議の成功のためにご尽力いただいた原子分子科学研究所のみなさんに深く感謝します。

## プログラム (口頭発表はすべて招待講演)

## 2010年3月1日 (月)

- 8:30 - 8:35 Opening Remarks (Yuh-Lin Wang, Director General of IAMS)
- 8:35 - 9:15 **Hiroki Nakamura** (IMS, Japan) "Future Perspectives of Non-Adiabatic Chemical Dynamics and Molecular Science in Asia"
- 9:15 - 9:45 **Kopin Liu** (IAMS, Taiwan) "Effects of Reactant Vibration on Chemical Reactivity"
- 9:45 - 10:15 **Wen-sheng Bian** (ICCAS, China) "Molecular Dynamics of Hydrogen-Oriented Chemical Reactions"
- 10:30 - 11:00 **Jian-ping Wang** (ICCAS, China) "Weak Hydrogen Bonding in Diols: An Infrared Spectroscopy and Ab initio Study"
- 11:00 - 11:30 **Jer-Lai Kuo** (IAMS, Taiwan) "A Hierarchical Approach to Study the Complex Structures of Water Clusters"
- 11:30 - 12:00 **Wei-jun Zheng** (ICCAS, China) "Photoelectron Spectroscopy of Mass-Selected Cluster Anions"
- 12:00 - 13:30 Business Meeting
- 13:45 - 14:15 **Shih-Huang Lee** (National Synchrotron Radiation Research Center, Taiwan)  
"Crossed-Beam Reactions of 3P and 1D Oxygen Atoms with Ethylene and Vinyl Fluoride"
- 14:15 - 14:45 **Sangyoub Lee** (Seoul National University, Korea)  
"A Rigorous Foundation of the Diffusion-Influenced Bimolecular Reaction Kinetics"
- 15:15 - 15:45 **Qiang Shi** (ICCAS, Taiwan) "Quantum Chemical Dynamics from Non-Perturbative Quantum Master Equation Methods"
- 15:45 - 16:15 **Kunihiro Kuwajima** (IMS, Japan) "Molecular Mechanisms of Protein Folding"
- 16:15 - 16:45 **Taiha Joo** (Pohang University of Science and Technology, Korea) "Molecular Mechanisms of Protein Folding"
- 16:45 - 18:15 Poster Session
- 18:30 - 20:30 Banquet

## 2010年3月2日 (火)

- 8:30 - 9:00 **Hiroki Okamoto** (IMS, Japan)  
"What Can be Imaged for Metal Nanostructures by Near-Field Microscopy?—Visualization of Localized Optical Fields and Plasmonic Wavefunctions —"
- 9:00 - 9:30 **Michitoshi Hayashi** (National Taiwan University, Taiwan)  
"Interaction between Plasmon-like Excitations of Metal-Atom Clusters and Optical Properties of the Adsorbed Molecules"
- 9:30 - 10:00 **Katsuyuki Nobusada** (IMS, Japan) "Near-Field and Matter Interaction Theory for Electron Dynamics in Nanostructures"
- 10:15 - 10:45 **Jeun-Kai Wang** (IAMS, Taiwan) "Nanoprobe Enhanced Optical Spectroscopy"
- 10:45 - 11:15 **Cheol Ho Choi** (Kyungpook National University, Korea) "Theoretical Surface Reaction Mechanisms on Semiconductor Surface"
- 11:15 - 11:45 **Jin Yong Lee** (Sungkyunkwan University, Korea) "Electronic and Magnetic Properties of Silicon Carbon Nanoribbons"
- 12:30 - 13:00 **Yasuhiro Uozumi** (IMS, Japan) "Organic Transformations in Water with Polymer-Supported"
- 13:00 - 13:30 **Seonghoon Lee** (Seoul National University, Korea)  
"The Transport through Chemical Structures: Organic Molecules, Organic Nanofibers, and Organic Crystals"
- 13:30 - 13:35 Concluding Remarks (Kaito Takahashi, IAMS)

