

共同利用研究ハイライト

X線小角散乱法による味覚受容体リガンド結合ドメインの味物質結合に伴う構造変化の解析

山下 敦子 岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 教授

1. はじめに

味覚受容は、口腔内の味覚受容細胞膜上に存在する味覚受容体が、食物に含まれる化学物質を感知し、その情報を生体内に伝達することで始まる。味覚受容体のうち、主に栄養素となる化学物質の感知を担う受容体は、T1rと呼ばれるタンパク質で構成されている。私たちヒトでは、T1r1とT1r3のヘテロ二量体がグルタミン酸などによるうま味受容、T1r2とT1r3のヘテロ二量体が糖などによる甘味受容を担っている^[1]。

「私たちはどのように味を感じているのか？」を理解する上では、「味覚受容体はどのように味物質を認識し、その情報を生体内に伝えているのか」を分子レベルで知ることが第一歩となる。一方、T1rは、発現・精製が極めて困難で、味物質結合やそれに伴い起こる受容体の変化を解析するには欠かせない精製タンパク質試料が得られておら

ず、分子解析は途上にあった。

2. T1r2a/T1r3リガンド結合ドメインヘテロ二量体試料と味物質結合

T1r受容体では、細胞外に存在し、約500アミノ酸残基からなるリガンド結合ドメイン(LBD)が、味物質結合とその後の受容体変化の起点を担う(図1)。そこで筆者らは、LBDに焦点を当て、複数の候補の中から、発現タンパク質が適切な局在と折りたたみを示すものをスクリーニングする戦略を取ることにした。マウスやヒト由来のものをはじめ、ほとんどのT1rLBDは、残念ながら発現時に適切に折りたたみられず、細胞外に移行しない結果が得られた^[2]。一方、スクリーニングしたさまざまな種由来T1rの中で、メダカ由来のT1r2aとT1r3のLBDが、適切な折りたたみと細胞外への移行を示すことを見出し、機能単位であるヘテロ二量体として発現・精製することに成功し

た^[3]。

メダカT1r2a/T1r3受容体は、種々のL-アミノ酸に応答を示すことが報告されていた^[4]。そこで、これらのアミノ酸がT1r2a/T1r3LBDに結合するかどうかを、等温滴定カロリーメトリーで測定した。その結果、受容体応答を引き起こすグルタミンやアラニンは、それぞれ数 μM ~数十 μM の濃度域で、実際にT1rLBDに結合を示すことが明らかとなった。さらに、それぞれのサブユニットに蛍光タンパク質を融合し、蛍光共鳴エネルギー移動(FRET)解析を行ったところ、同じ濃度域のアミノ酸の添加により、FRET効率の変化が起こったことから、T1rLBDが、味物質であるアミノ酸の結合により、何らかの構造変化を示すことがわかった^[3]。

3. T1r2a/T1r3リガンド結合ドメインヘテロ二量体の味物質結合に伴う構造変化

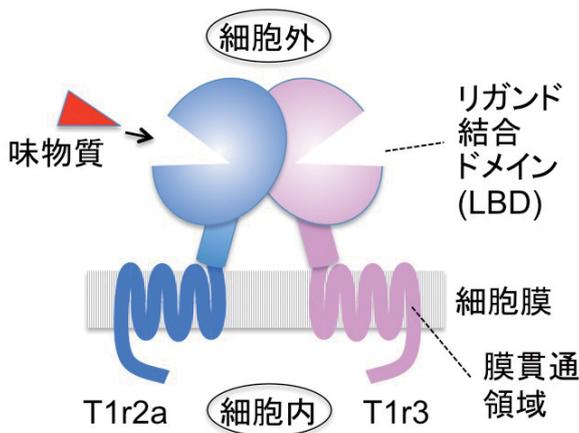


図1 味覚受容体T1rの概略図。

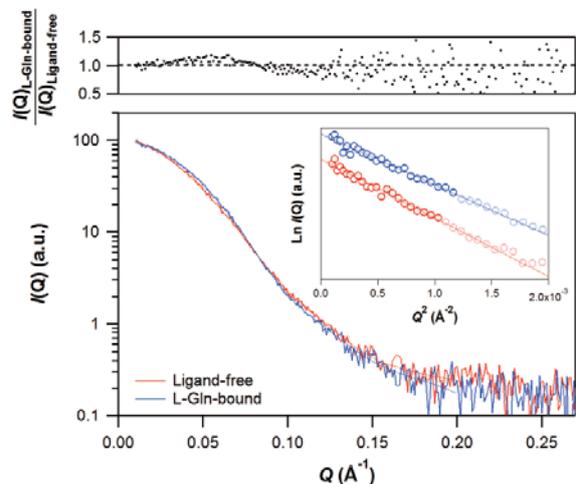


図2 T1r2a/T1r3リガンド結合ドメインヘテロ二量体のX線散乱曲線とギニエプロット(挿入図)^[3]。赤色と青色がそれぞれ味物質非存在下および存在下での散乱曲線を示す。

では、味物質結合は、どのような構造変化をT1rLBDにもたらすのだろうか？筆者らは、分子研のX線溶液散乱装置iMSaxsを利用し、T1r2a/T1r3LBD溶液のX線小角散乱実験を行った。その結果、(1) 散乱曲線のギニエプロットから、T1r2a/T1r3LBD分子の慣性半径は、味物質（グルタミン）非存在下（ $39.8 \pm 0.6 \text{ \AA}$ ）とくらべ、味物質存在下では小さくなる（ $37.0 \pm 0.5 \text{ \AA}$ ）こと（図2）、(2) 散乱曲線から算出した距離分布関数から、分子の最大長も、味物質非存在下（ 143 \AA ）にくらべ、存在下では小さくなる（ 112 \AA ）ことが判明した^[3]。これらの結果は、味物質の結合に伴い、T1rLBDが、広がった構造からコンパクトな構造に変化することを示している（図3）。これまでに報告されている類似受容体の立体構造から算出した結果と比較すると、T1r2a/T1r3LBDは、二量体相互作用様式の変化に匹敵する、比較的大きな構造変化を示していることが明らかとなった。細胞外にあるLBDのこの構造変化が、味物質結合によって起こる味覚受容の初反応となり、受容体の膜貫通領域に伝達され、結果として細胞内情報伝達タンパク質の活性化を引き起

こしていると推測される。

5. おわりに

本研究は、日々体感する生体反応ながら、分子レベルでのメカニズム解明が遅れていた味覚受容について、分子研のサポートにより、初めて分子レベル解析の俎上にのせることができたものと考えている。この成果を基盤に、さらなる研究の発展を目指している。

本研究は、分子研・秋山修志教授との共同研究として、協力研究（ナノテクノロジープラットフォーム）の枠組みで実施した。秋山教授には、iMSaxs

を利用した夜を徹したデータ収集から、解析に至るまで、懇切丁寧なご支援をいただいた。初挑戦の解析法に不慣れだった筆者にとって、この協力研究がなければ、研究をまとめるのに困難を増していただろうと思うと、感謝の念でいっぱいである。新しい実験系の導入は、少々ハードルがあるが、研究を前に進める重要な転換点となることが多い。そのハードルを下げ着実な結果が出るようサポートいただける、このような支援制度の継続と発展を、心より願っている。

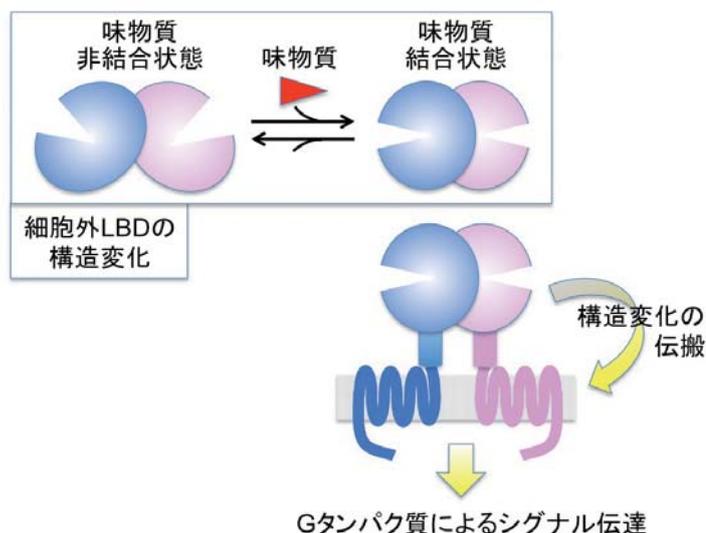


図3 今回の結果より推測された味覚受容体T1rLBDの構造変化と受容体シグナル伝達のメカニズム。

参考文献

- [1] Yarmolinsky *et al.* *Cell* **139**, 234 (2009).
- [2] Ashikawa *et al.* *Prot. Sci.* **20**, 1720 (2011).
- [3] Nango *et al.* *Sci. Rep.* **6**, 25745 (2016).
- [4] Oike *et al.* *J. Neurosci.* **27**, 5584 (2007).



やました・あつこ

1998年京都大学大学院農学研究科農芸化学専攻博士後期課程修了、博士（農学）。理化学研究所基礎科学特別研究員、同研究員、コロンビア大学博士研究員、理化学研究所放射光科学総合研究センターチームリーダーなどを経て2012年6月より現職。専門は構造生物学。

共同利用研究ハイライト

腸管出血性大腸菌感染症の治療薬開発のための
in silico 研究

尾又 一実 国立国際医療研究センター 数理疫学研究室室長

1. 流行が続く腸管出血性大腸菌感染症

本邦における腸管出血性大腸菌 Enterohemorrhagic *Escherichia coli* (EHEC) 感染報告数は、1996年の大流行以降も年間約4,000人前後で推移しており(図1(a))^[1]、有効な薬剤がいまだ開発されていないことを考えると、この傾向が今後も続くという可能性は大きい。EHEC感染症は症状に大きな幅があり、全く症状がないもの、軽い腹痛や下痢のみで終わるものから、およそ3~8日の潜伏期において頻回の水様便、激しい腹痛、著しい血便、さらにはこれら有症者の6~7%が、溶血性尿毒症症候群(HUS)や脳症などの重篤な合併症を起こし、ときには死に至るものまである^[2]。

EHEC感染症が認知されたのは、1982年、アメリカ・オレゴン州とミシガン州でハンバーガーによる集団食中毒事件があり、患者の糞便からO157が原因菌として見つかったのが最初で^[1,2,3]、それ以前はその存在が知られていなかった。本邦では、1984年に大阪府で、2才と5才の兄弟が腹痛と水様性下痢を

発症し、血性下痢になったのが最初の報告であろう。当時はまだEHECの認知度が低かったので、詳しい検査は実施されず、原因不明の下痢症として処理されたが、翌年、保存されていた弟の糞便からO157が検出された^[3]。

2. 志賀毒素とその阻害分子

EHEC感染症の病原分子は、EHECが産生する志賀毒素(ヴェロ毒素ともいう)である。EHECの血清型は、菌の表面にあるO抗原(細胞壁由来)とH抗原(べん毛由来)により細かく分類されており^[2]、代表的な血清型にO157:H7がある(図1(b))。EHECは、血清型によって、志賀毒素を産生するものとしめないものがある。

志賀毒素(Stx)は、Aサブユニット(StxA)とBサブユニット(StxB)からなる。StxBは標的細胞膜上の中性糖脂質であるグロボトリアオシルセラミド(Gb3)の糖鎖部を特異的に認識し、これによりStxはエンドサイトーシスで細胞内に侵入する。StxAは侵入後の細胞内での毒素活性を担う^[4]。本研究

で着目するStxBは5量体タンパク質である(図2a)。Stxには2種類のファミリー、Stx1、Stx2があり、StxBの残基数は1量体あたりそれぞれ69個と70個、合計で345個と350個である。StxBの形状は平面的で、明らかな結合ポケットを持たない。結合サイトは1量体あたり3箇所あることが知られており^[4,5]、合計15個が、表面上に分布している(図2a)。

西川喜代孝の研究グループは、これまでに多くのStxB阻害分子を考案してきたが^[4,6,7]、最近、ペプチド・ライブラリー法を利用して、Stx1B、Stx2B双方に強く結合するリガンド、MMAtetを開発した^[7]。このリガンドは、彼らが長年研究を続けている、“腕”のある(多価の)ペプチド・オリゴマーの一つで、腕(ライブラリー部分)の数は4本、各腕のアミノ酸配列(モチーフ)は、MAMMARRRRAである(図2b)。この大きさは、StxBの表面をほぼ覆う大きさである。

StxBは、単独^[8]もしくはGb3やその他の分子との複合体^[5,9,10,11]はX線解

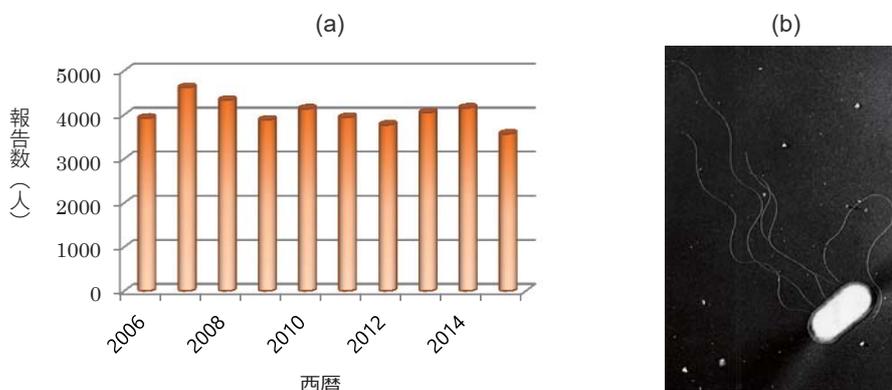


図1 (a)国内の2006-2015の期間の腸管出血性大腸菌感染症報告数。(b)腸管出血性大腸菌O157:H7の電子顕微鏡写真(国立感染症研究所 <http://www.nih.go.jp/niid/ja/ehec-m/2055-bac1/related/710-ehec-o157sem.html>)。

析によって結晶構造が明らかにされているが、西川らのペプチド性阻害薬との複合体は現在のところ結晶化に成功していないため、その静的な構造さえ不明である。そこで、本研究では、分子動力学 (MD) シミュレーションの方法により、Stx1のBサブユニット (Stx1B) とMMAtetの結合を詳しく検討することにした。

3. In silico研究の方法

MDシミュレーションは、高速計算プログラムGeneralized-Ensemble Molecular Biophysics (GEMB、奥村久士准教授 (分子研) による開発)^[12]を使って行った。このプログラムは、腕を持つ樹状分子を扱うことができる。Stx1Bの初期構造は、PDBコード1BOSを用いた。水分子は約2万個が必要と見積もられ、力場は、StxBとMMAtetにはAMBER99SBを、水分子にはTIP3Pを用いた。

4. 計算結果

MMAtetのライブラリー部分1本単独をStx1Bに結合させた場合、Stx1Bの結合サイトにある酸性アミノ酸 (アスパラギン酸、グルタミン酸) に、リガンドの塩基性アミノ酸 (アルギニン) が引き寄せられるように結合した。単独のライブラリー部分4本をStx1Bに結合させた場合は、一つの例として、2本のペプチドはStx1Bの表側に結合したが、他の2本は裏側と側面に結合する、といった結果が得られた。ただし、Stx1Bの裏側にはStx1Aがあるので、裏側への結合ということは現実にはあり得ない。この計算結果は、4本は同じものであるから同じ電荷をもって、相互に斥力が働いたことを示していると考えられる。このことは、西川らの生物学実験で、ライブラリー単

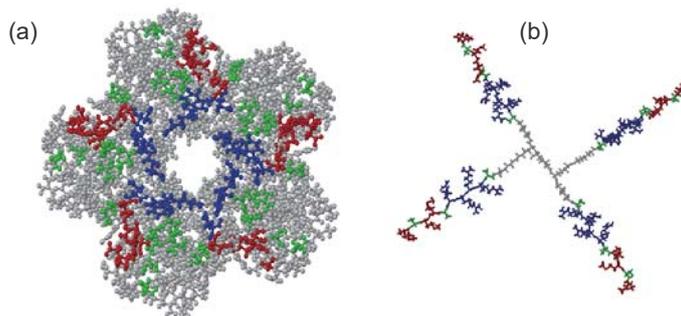


図2 (a) Stx1B と (b) MMAtet の構造。Stx1B の3種類の結合サイトの原子を赤、緑、青で示す。MMAtet は、M (メチオニン)、A (アラニン)、R (アルギニン) の原子をそれぞれ赤、緑、青で示す。

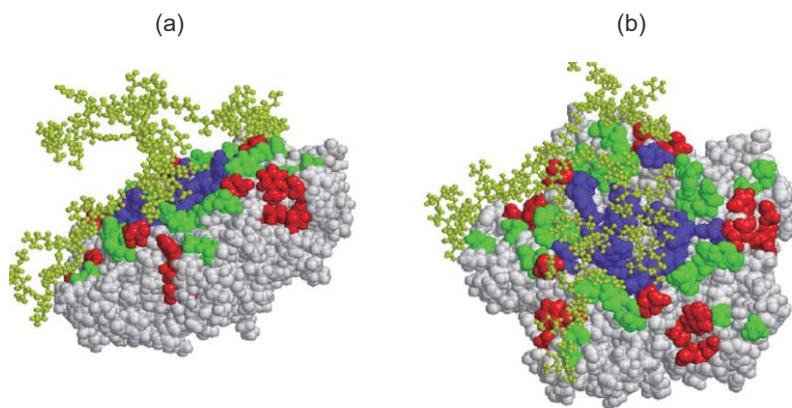


図3 時間 10ns(a)、150ns(b)における、Stx1B-MMAtet 複合体の構造。Stx1B、MMA-tet はそれぞれ、space-fill、黄色の ball-and-stick で示した。赤、青、緑は Stx1B の3種類の結合サイトを表す。

量体の場合は、StxBの結合サイトに対する結合モチーフがまったく得られなかったという事実^[4]と符合している。

ペプチド・ライブラリー4本を結合して4量体を作り (MMAtet)、Stx1Bに結合させた場合、各ライブラリー部分は、上記の場合のように分散することなく、Stx1Bの表側に結合した (図3)。Stx2BについてもMDシミュレーションを行った結果、同様の結合が見られた。Stx1B-MMAtet 複合体のスナップショットを図3に示す。時間10nsで (図3a)、十分結合していなかったリガンドの一部は、150nsでは (図3b)、Stx1との距離がかなり小さくなった。

Stx1BとMMAtetの結合を定量的に検討するために、MMAtetのアミノ酸残基 i と Stx1Bのアミノ酸残基 k の重心間の距離 d_{ik} を計算し、結合スコア S_{ik}

を $S_{ik}=1/d_{ik}$ と定義した。図4aに、結合スコアの等高線のスナップショットを示す。腕の一つArm1はStx1B全体に広がって結合しているが、他の腕はStx1B上の偏った領域に結合していることがわかる。たとえば、Arm4は、Stx1Bの5量体の内、図の下部のバーの一番左に示した単量体との結合スコアが高い。

Stx1Bの5量体の各単量体、およびMMAtetの各腕は、同じアミノ酸配列なので、双方について結合スコアの和をとって集約すると、図4bのような等高線が得られる。スコアの高い領域が、3~4か所あるのがわかり、これらはいずれも縦帯状になっていて、MMAtetが、Stx1Bの限られたアミノ酸残基に選択的に結合していることを示している。この選択性は、他のサンプルにつ

いても見られ、かつ、選択部分はほぼ同じであった。

どのアミノ酸が強く結合しているかを見るために、スコアの高い結合について検討した。Arm1では、Stx1BのW34、N35、D18、がスコアの高いアミノ酸で、Arm2-4では、N55、H58、G61、G62、が多く見られた。西川らの最近のミュレーション実験では、D17、D18、F30、W34、G62、が着目され、これらをグルタミン酸、アラニンなどに置換すると、結合度が著しく低下することが示されている^[7]。したがって、本研究の結果は、実験結果との良好な一致を示していると考え

ことができ、現実のStxB-MMAtet結合を反映しているであろうと推論される。また、ミュレーション実験で着目されていないアミノ酸が、シミュレーションでは結合に寄与していると思えることがあるが(N55、H58など)、以前の研究で^[6]、簡単なMDシミュレーションにより、StxBのいくつかの残基

がリガンドの結合に寄与していることが示唆され、生物学実験に採用された。これらのことから、本研究のMDシミュレーションは、EHEC感染症に関する生物学実験および薬剤の開発において、重要な役割を担っているといえる。

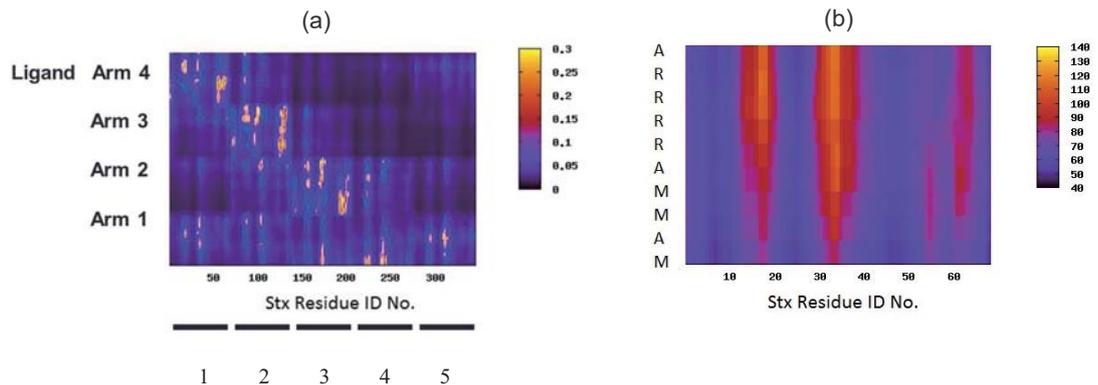


図4 (a) 結合スコア S_{ik} の等高線のスナップショット。縦軸はMMAtet (リガンド) の各腕の識別番号、横軸は志賀毒素のアミノ酸残基 k の識別番号で、下のバーは5量体の各単量体を示す。MMAtetのアミノ酸配列は、各腕について下からMAMMARRRA。(b) Stx1Bの5量体の各単量体およびMMAtetの各腕について和をとった結合スコアの等高線。時間140-150ns。縦軸はMMAtetのアミノ酸配列、横軸はStx1Bのアミノ酸残基の識別番号で、各単量体のアミノ酸識別番号は、1番目の単量体の番号1~69に集約した。

参考文献

- [1] 国立感染症研究所, *IASR* **37**, 85-86 (2016).
- [2] 厚生労働省, http://www1.mhlw.go.jp/o-157/o157q_a.
- [3] 大阪府立公衆衛生研究所, *公衛研ニュース No.1* (1997).
- [4] 西川喜代孝, 志賀毒素の細胞内輸送を誘導するペプチド, *蛋白質 核酸 酵素* **53**, 44-51 (2008).
- [5] H. Ling et al., Structure of the Shiga-like Toxin I B-Pentamer Complexed with an Analogue of Its Receptor Gb3. *Biochemistry* **37**, 1777-88 (1998).
- [6] K. Nishikawa, M. Watanabe, E. Kita, K. Igai, K. Omata, M.B. Yaffe, and Y. Natori, A multivalent peptide library approach identifies a novel Shiga toxin inhibitor that induces aberrant cellular transport of the toxin, *The FASEB Journal*, **20**: 2597-9, 2006.
- [7] K. Tsutsuki, M. Watanabe-Takahashi, Y. Takenaka, E. Kita, and K. Nishikawa, Identification of a Peptide-Based Neutralizer That Potently Inhibits Both Shiga Toxins 1 and 2 by Targeting Specific Receptor-Binding Regions, *Infect. Immun.* **81**, 2133-2138 (2013).
- [8] M.E. Fraser et al., Structure of Shiga Toxin Type 2 (Stx2) from *Escherichia coli* O157:H7, *J. Biol. Chem.* **279**, 27511-27517 (2004).
- [9] P.I. Kitov et al., Shiga-like toxins are neutralized by tailored multivalent carbohydrate ligands, *Nature* **403**, 669-672 (2000).
- [10] J.M. Jacobson et al., The crystal structure of Shiga toxin type 2 with bound disaccharide guides the design of a heterobifunctional toxin inhibitor, *The J. Biol. Chem.* **289**, 885-894 (2014).
- [11] M.E. Fraser et al., Binding of adenine to Stx2, the protein toxin from *Escherichia coli* O157:H7, *Acta Cryst.* **F62**, 627-630 (2006).
- [12] H. Okumura, Temperature and pressure denaturation of chignolin: Folding and unfolding simulation by multibaric-multithermal molecular dynamics method, *Proteins*, **80**: 2397-2416, 2012.



おまた・かずみ
 1988年慶應義塾大学工学部物理学科卒、
 1999年同大学院博士課程修了、同大学助手。
 この間、東京工業大学、日本IBMに在籍。
 2001年より現職、
 2002~2004年コペンハーゲン大学エルステッド
 研究所研究員。
 専門：計算医学。
 趣味：ゴルフ、禅の文化の探求、動植物の飼育、音楽。

1. はじめに

金属錯体は、電子状態の多様な金属イオンと、設計性に富んだ有機配位子で構成され、2つをうまく組み合わせ、規則的に配列された集積型金属錯体は、無機物や有機物を超える物性や機能が期待されている。中でも、d軌道に不対電子を有する常磁性金属を、(金属) - (配位子) - (金属) と繋げ、配位子のπ軌道を介した磁氣的相互作用に関する研究が精力的に進められてきた。一方で、常磁性金属を(金属) - (異種金属) - (金属) と繋げ、異種金属のd軌道を介して磁気物性の発現を狙った研究はあるだろうか？ 我々は、複数種類の金属を、直接の金属結合で規則的に一次元状に並べることに成功しており^[1] (図1)、並んだ金属の中には常磁性種もある。金属結合で一列に並んだ一次元鎖錯体には、古くはKCPやマグナス塩が、近年ではロジウムや白金などの平面性d8金属が一次元集積化したものが報告されているが、導電物性に関する

研究がメインであり、化合物の種類も少ない。本稿では、2種類の金属錯体のフロンティア軌道を考慮した異種金属一次元鎖錯体の合成法と特徴を紹介するとともに、常磁性化した最近の結果を述べたい。

2. 異種金属一次元鎖錯体の特徴と常磁性化

図1に示すような金属の並びを有する異種金属一次元鎖錯体は、主に複核錯体で構成されている。一般に、金属結合をもつ複核錯体の分子軌道は、双方のd²軌道からσとσ*軌道、d_{yz}もしくはd_{xz}軌道から縮重したπとπ*軌道、d_{xy}軌道からのδとδ*軌道を用いて表せる。一次元鎖はz方向に伸長化するので、σ性軌道のHOMO-LUMO相互作用を利用すれば、複核錯体同士を上手に繋げられるはずである。例えば、[Pt₂(piam)₂(NH₃)₄]X₂ (piam = pivalamidate、X = アニオン) の金属酸化数はPt^{II,III}でσ*軌道にHOMOをもち、

[Rh₂(O₂CCF₃)₄]はRh^{II,III}でσ*軌道にLUMOをもつ。この2つを混合すると緑色単結晶(1)が得られ、[Rh₂(O₂CCF₃)₄]は2つの[Pt₂(piam)₂(NH₃)₄]によりサンドイッチされ、-Pt-Pt-Rh-Rh-Pt-Pt-と並んだ一次元鎖を生成する^[2] (図2a)。1はz方向に繋がることで、σ性軌道による価電子帯(VB)と伝導帯(CB)を形成し、このバンド間に[Rh₂(O₂CCF₃)₄]のπ*軌道が挿入した電子構造をとる。1の拡散反射スペクトルは、この電子構造を反映し、VBからCBへの遷移に相当するE₁ (2.67、2.23 eV) と、挿入したπ*軌道からCBへの遷移によるE₂ (1.85 eV) とE₃ (1.55 eV) がみられる。

[Rh₂(O₂CCF₃)₄]の替わりに、[Rh₂(O₂CCH₃)₄]または[Rh₂(NHCOCH₃)₄]を用いても、同様に-Pt-Pt-Rh-Rh-Pt-Pt-と並んだ一次元鎖錯体の2と3が得られる^[2,3] (図2bと2c)。拡散反射スペクトルも、1と同様に、3つのE₁、E₂、E₃の吸収がみら

異種金属一次元鎖錯体

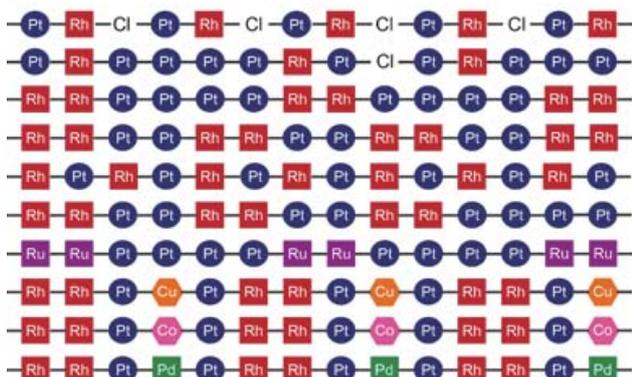


図1 我々が得ている異種金属一次元鎖錯体中の金属の並び方。

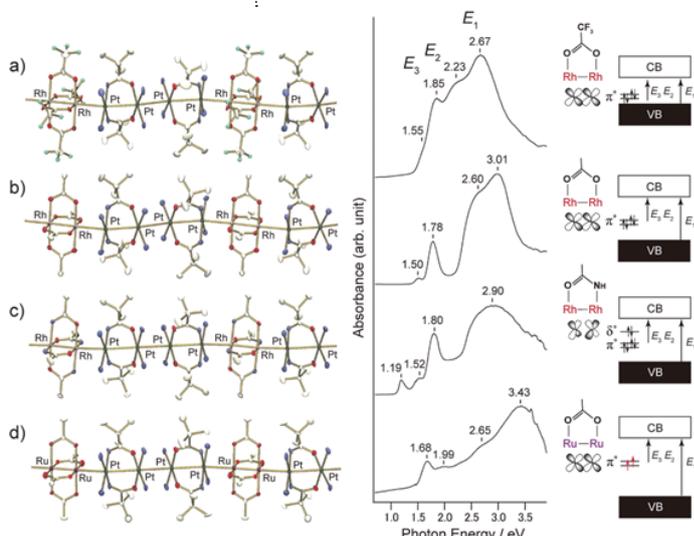


図2 a) 1、b) 2、c) 3、d) 4の一次元構造、拡散反射スペクトルおよび簡易的な電子構造。

れるが、 E_1 が**1**と比べ0.3 eVほど大きく、バンドギャップが広がっていることがわかる。また、**3**では架橋配位子のアミド基の π 供与のため、 δ^* 軌道がHOMOと考えられる。すなわち、**1-3**は同じ金属の並びをもつにも関わらず、電子構造が大きく異なっている。

$[\text{Ru}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4]$ は縮重した π^* 軌道に2つの対電子を有するため常磁性であり、 $[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4]$ と同様、 σ^* 軌道にLUMOをもつ。 $[\text{Ru}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4]$ と $[\text{Pt}_2(\text{pam})_2(\text{NH}_3)_4]\text{X}_2$ を混合すると、茶色単結晶(**4**)が得られた。単結晶X線構造解析の結果、 $-\text{Pt}-\text{Pt}-\text{Ru}-\text{Ru}-\text{Pt}-\text{Pt}$ と並んだ一次元鎖錯体であり、**2**と比較すると、**4**はRhをRuに変えただけの構造であった^[4](図2d)。拡散反射スペクトルでは、 E_1 が3.43 eVと、バンドギャップが広がっていた。

図3には、**4**の磁化率測定の結果を示すが、300 Kの χT 値が0.95

$\text{cm}^3\text{Kmol}^{-1}$ と、 $-\text{Pt}-\text{Pt}-\text{Ru}-\text{Ru}-\text{Pt}-\text{Pt}$ あたり2つの対電子に相当し、 $[\text{Ru}_2]$ の縮重した π^* 軌道に2つの対電子があることがわかった。すなわち、Ru上の対電子は消失せず、常磁性種を金属結合で一次元鎖化することに成功した。 χT 値は低温になるにつれて減少し、2 Kで $0.07 \text{ cm}^3\text{Kmol}^{-1}$ になったが、この減少は $[\text{Ru}_2]$ 内でのゼロ磁場分裂による寄与が大きく、フィッティングの結果、隣接 $[\text{Ru}_2]$ との反強磁性的相互作用の大きさは -1.4 cm^{-1} と、弱いことがわかった。この交換相互作用の小ささは、対電子のあるd軌道が、隣接金属のd軌道と空間的に重なり合っていないためと考えられ、今後の課題となっている。

3. おわりに

2種類の金属錯体のフロンティア軌道を考慮すれば、常磁性の金属同士を金

属結合で繋げることができ、通常、単一種では並ばない種類の金属を一次元状に並べることが可能である。まだまだ面白い物性は出ていないが、岐阜で新しい常磁性一次元鎖錯体を合成し、岡崎で興味深い磁気物性を見出そうと、日々奮闘中である。本研究は、ナノテクノロジープラットフォーム共同利用の支援を受けて遂行されました。著者の所属する大学では極低温で磁気物性を測定できず、よく整備されたSQUID型磁化測定装置(Quantum Design MPMS-7)を分子研で使用できることは大変ありがたく感謝する次第です。この共同利用は、管理と維持が大変な大型装置を利用できるだけでなく、旅費のサポートまで受けられる大変嬉しいシステムで、今後とも是非継続して頂きたいと願っています。

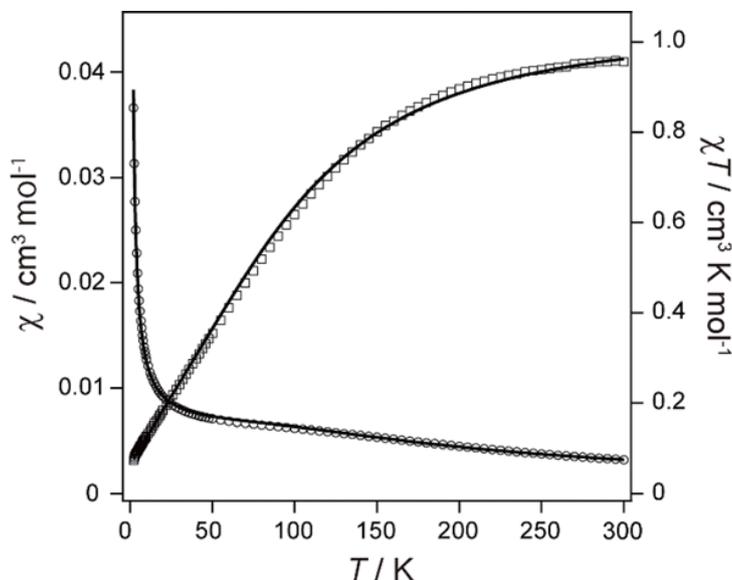


図3 **4**の2-300 Kの磁化率測定: ○は χ 、□は χT 、実線はフィッティングの結果。

参考文献

- [1] 植村 一広, セラミックス, **2016**, *51*, 748-751.
- [2] K. Uemura, M. Ebihara, *Inorg. Chem.*, **2011**, *50*, 7919-7921.
- [3] K. Uemura, T. Kanbara, M. Ebihara, *Inorg. Chem.*, **2014**, *53*, 4621-4628.
- [4] K. Uemura, N. Uesugi, A. Matsuyama, M. Ebihara, H. Yoshikawa, K. Awaga, *Inorg. Chem.*, **2016**, *55*, 7003-7011.



うえむら・かずひろ

1999年京都大学工学部工業化学科卒業。2004年京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻博士後期課程修了。2004年早稲田大学大学院理工学研究科 客員研究助手。2006年山口大学大学院理工学研究科助手。2009年岐阜大学工学部助教。2014年より現職。

専門: 金属錯体化学
趣味: 野菜作り

「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」の開催報告

水野 雄太 東京大学大学院総合文化研究科 博士課程2年

1. はじめに

「分子科学若手の会」は、実験・理論・計算を問わず分子科学に関心を持つ若手研究者の交流と勉学の機会を設け、分子科学全体の研究活動の推進と発展に寄与することを目的として活動する団体である。弊会では、全国から若手研究者が集まる勉強合宿である分子科学若手の会夏の学校（以下、夏の学校）を年に一回開催し、さらに各地方に置かれた支部局が勉強・交流企画を数か月ごとに地方単位で開催しており、近年は隣接他分野の若手の会との

合同企画も盛んに行っている。

2016年度の夏の学校は、1961年の初開催から数えて56回目にあたり、先駆的な研究を推進されている研究者の方々を講師としてお招きし、全国から若手参加者を募り、先生方の講義・講演と参加者同士の議論・情報交換の場を提供することを目的として8月に京都で開催された。夏の学校開催にあたり、分子科学研究所の平成28年度共同利用研究（前期）「若手研究会等」の支援のもと、「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」を夏の学校

の事前準備として行い、そこでの議論・意見交換の成果は夏の学校の企画運営に大いに反映された。

本稿では、「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」と「第56回分子科学若手の会夏の学校」について報告する。

2. 第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会

6月26日に分子科学研究所にて行われた講義内容検討会では、夏の学校での講義（分科会）を引き受けていただ



写真1 分科会の様子（第1分科会）。



写真2 分科会の様子（第2分科会）。



写真3 全体講演の様子。
（第4分科会 城田先生のご講演）

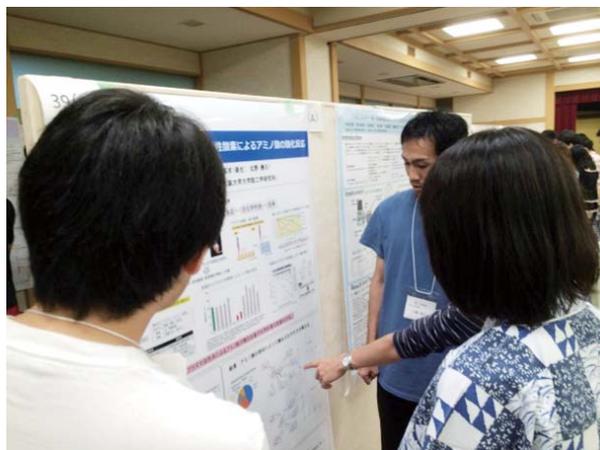


写真4 ポスターセッションの様子。

いた5名の講師の方々と弊社役員により、分科会の内容とテキストの詳細を検討した。また、弊会の役員会議を同時に開催し、夏の学校当日の各種企画の打ち合わせ、会の現在の運営状況や今後の方針についての議論を行った。

3. 第56回分子科学若手の会夏の学校

2016年度の夏の学校は、8月22日-26日に京都大学吉田キャンパス北部構内（分科会・講演会場）と聖護院御殿荘（各種企画・宿泊会場）において開催した。講師を除く参加者は79名であった。

【特別講演】

夏の学校の冒頭で、高塚和夫先生（京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー、東京大学名誉教授）に分子科学の歴史と展望をご自身の研究来歴を含めご講演いただき、若手研究者に対する熱いメッセージをいただいた。

【分科会・全体講演】

参加者は以下の5つの分科会に分かれて、それぞれ4日間の集中講義を受けた。また、先生方が取り組まれている最先端の研究について全参加者の前

でご講演いただいた。

1. 高柳 敏幸 先生（埼玉大学 教授）
「量子衝突論の基礎と化学反応動力学への応用」
2. 石崎 章仁 先生（分子科学研究所 教授）
「凝縮相化学動力学の理論 —光学応答と量子動力学—」
3. 大下 慶次郎 先生（東北大学 助教）
「イオン移動度分析法を中心とした気相分光実験」
4. 城田 秀明 先生（千葉大学 准教授）
「液体・溶液の分子間ダイナミクス：低振動数領域の分光手法とスペクトルの解釈」
5. 清野 淳司 先生（早稲田大学 次席研究員）
「相対論的電子論」

【質問コーナー】

前年度に引き続き、分科会講師の先生方に、キャリアパスや海外留学、普段の勉強の仕方などについて参加者から寄せられた質問に回答していただく場を設け、参加者にとって有意義な情報獲得の場となった。

【ポスターセッション】

参加者によるポスターセッションでは、4晩にわたり51件の発表が行われ

た。全国から集まった様々な分野の参加者による活発な議論が行われ、分野の垣根を越えた学术交流の場となった。

【研究交流会・自由集会】

参加者同士の交流を促進する企画として、少人数グループ内で自己紹介や自身の研究紹介をする自己紹介・研究交流会、テーマごとにグループに分かれて参加者同士で自由に議論する自由集會を企画した。これらの企画は今年が初の試みであり、企画にあたり講義内容検討会での議論は重要であった。

4. まとめ

本稿では「第56回分子科学若手の会夏の学校 講義内容検討会」及び「第56回分子科学若手の会夏の学校」の活動報告を行った。2017年度の夏の学校については、分子科学若手の会事務局新代表 沖野隼之介（学習院大学大学院自然科学研究科岩田研究室博士後期課程1年）を中心に鋭意準備を進めている。

今後とも弊社へのご支援を賜りますよう、分子科学研究所並びに諸先生方をお願い申し上げます。



写真5：全体集合写真。