受賞者の声

山内 仁喬(物理科学研究科 構造分子科学専攻 5年一貫制博士課程2年)

第11回分子科学討論会 優秀ポスター賞

2017年9月15~18日に東北大学 で開催された第11回分子科学討論会に おいて、『定温定圧レプリカ置換分子 動力学法によって明らかになった高圧 環境下におけるシニョリンの特異な振 る舞い』というタイトルでポスター発 表を行い、優秀ポスター賞を受賞しま した。ポスターセッションでは多くの 方が私のポスターを聞きに来られ、非 常に有意義なディスカッションをする ことが出来ました。議論に熱中してし まい、100分間のポスターセッション はあっという間に終わってしまったよ うに感じました。今回の発表を、この よう形で評価していただいて、とても 嬉しく思います。

これまで私は、効率的なシミュレー ション手法として、定温定圧レプリ

力置換分子動力学法を開発してきまし た。今回の受賞対象となった研究で は、本手法をシニョリンと呼ばれるペ プチドに適用し、フォールド状態とミ スフォールド状態で高圧環境下におけ る安定性が異なることを発見しました。 このような振る舞いは、これまで実験 でもシミュレーションでも報告されて おらず、今回新たに予言した現象です。 また、シニョリンのフォールド状態と ミスフォールド状態は互いによく似た βヘアピン構造を持っているため、圧 力に対する応答が異なるというのは自 明ではありません。私は、フォールド 状態とミスフォールド状態のアミノ酸 の側鎖の配向の違いが高圧環境下での 安定性に影響しているという、分子論 的メカニズムを明らかにしました。詳



細は、分子科学討論会の要旨(http:// www.molsci.jp/2017/lectures/ pdf/3P112_m.pdf)をご覧ください。

今回の受賞に際し、研究および研究 発表について親切・丁寧に指導くださ いました奥村久士准教授をはじめとし て、研究室の皆様からは多くのご助言 とご支援を頂きました。深く感謝いた します。この受賞を励みに、より一層 研究を頑張っていきたいと思います。

藤瀬 光香(物理科学研究科 機能分子科学専攻 5年一貫制博士課程2年)

33rd Symposium on Chemical Kinetics and **Dynamics Best Poster Prize**

2017年6月7-9日に名古屋大学 で開催された33rd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics にてポスター発表を行い、Best Poster Prizeを受賞しました。これまでにも、 ポスター発表をさせていただく機会は 何度かありましたが、時間と緊張と喉 の渇きを忘れられたのは今回が初めて でした。たくさんの先生方や若手研究 者の方々と非常に有意義な議論ができ たこと、終わった後の手応えと昂揚感 は確かに覚えていて、これは今後の 研究に対する大きなモチベーションと なっています。

ポスター発表では、CH₃CI分子に ついて、化学結合に直接関与しない内 殻電子のイオン化に伴って放出され るオージェ電子と、最終生成物である フラグメントイオンとの同時計測実験 について報告しました。H3+の生成に おいてイオン化サイト選択性が極めて 大きいこと、また、特定のオージェ終 状態がH3+の生成に大きく寄与して いることが示唆されました。実験結果 の詳細な理解のため、重水素化された CD₃CI分子や CH₃Br分子を用いた研 究を現在行っています。

今回の受賞は、研究室の繁政英治准



教授、岩山洋士助教をはじめ、UVSOR スタッフのみなさまからの日頃のご指 導とご支援のおかげです。また、直前 に練習に付き合っていただいた名古屋 大学の出身研究室の先輩や先生方にも アドバイスを頂きました。受賞したこ とを振り返り、たくさんの人に支えて いただいていることを改めて実感して います。心から感謝申し上げます。