

第1回分子科学討論会(仙台) 招待講演

魚崎浩平 (北海道大院理)

「表面和周波発生分光法による固液界面における分子構造の評価と反応の追跡」

宇田川康夫 (東北大多元研)

「X線ラマン散乱: 共鳴と非共鳴」

江幡孝之 (広島大院理)

「機能性分子の超音速ジェット分光- 新たな機能の発見を目指して- 」

岡畑恵雄 (東工大フロンティア創造共同研)

「振動現象を利用した生体分子の水和と粘弾性の評価」

腰原伸也 (東工大フロンティア創造共同研)

「分子の励起状態と構造ダイナミクスが生み出す新しい機能物質」

工位武治 (大阪市立大院理)

「分子スピン量子コンピュータの実現に向けて」

佃達哉 (分子科学研究所)

「金クラスターのサイズ選択的合成と構造・物性」

山口兆 (大阪大院理)

「多核遷移金属酵素の電子状態に関する理論的研究」

寺嶋正秀 (京都大院理)

「タンパク質反応解明を目指した生体分子科学研究」

奨励賞受賞講演(分子構造総合討論会2006)

高口博志 (理化学研究所)

「励起酸素原子の反応ダイナミクス研究」

佐藤啓文 (京都大院工)

「溶液内分子の理論化学: 量子化学と統計力学の視点から」

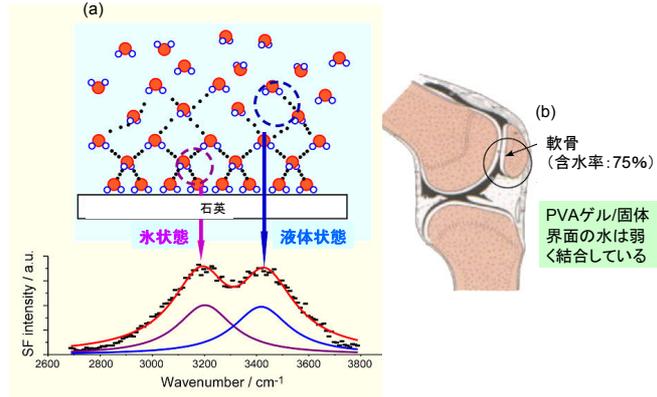
魚崎浩平（北海道大院理）

研究タイトル：

「表面和周波発生分光法による固液界面における分子構造の評価と反応の追跡」

研究概要：

電極反応や生体分子の構造・機能発現において周囲の水が大きな役割を果たしています。したがって、電極や生体分子周囲（界面）の水の構造を明らかにすることは非常に重要です。しかし、これまでの計測法の多くは溶液中では利用できず、また大量に存在するバルクの水の妨害で界面水の情報を得ることはできませんでした。振動数 ω_1 と ω_2 の強力なレーザー光を同一点に集光すると $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ の光が発生します（和周波発生）が、この現象を利用すると、界面に存在する水や固体表面の分子構造を選択的に決定することができます。



図の説明：

(a) 石英/水界面の和周波発生分光(SFG)スペクトルと水の構造。数字(振動数)が大きいほど水分子同士の結合の程度が小さい。3450cm⁻¹付近に見られるピークは液体状態の水、3200cm⁻¹付近に見られるピークは氷状態の水に近い。
 (b) 生体内では多くの運動が小さな摩擦で起こる。関節では水含量の高い軟骨の存在が低摩擦に重要だと考えられている。そのモデル物質として考えられているPVAゲルを固体に押しつけると接触前に比べて結合の程度が低い水が支配的となった。

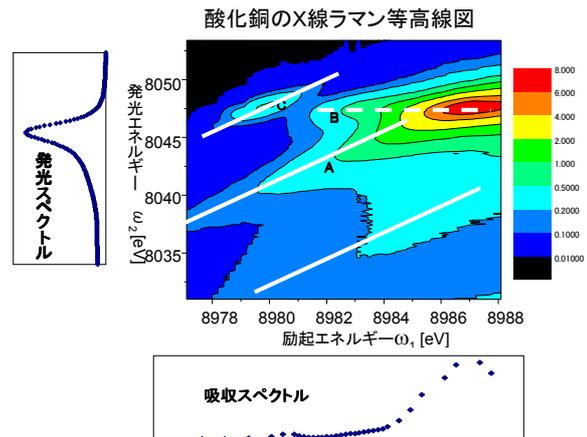
宇田川康夫（東北大多元研）

研究タイトル：

「X線ラマン散乱：共鳴と非共鳴」

研究概要：

可視光によるラマン効果の発見は物理・化学の世界に大きな衝撃をもたらし、ラマンはその僅か2年後にノーベル物理学を受賞したが、X線領域におけるラマン効果の研究はほとんどされていなかった。しかし最近では強力な放射光の出現と分光器・検出器の高感度化によってX線ラマン効果が従来のX線分光からは得られない情報が得られ、高温超伝導の機構や光触媒作用の解明に有効であることが明らかになりつつある。



図の説明：

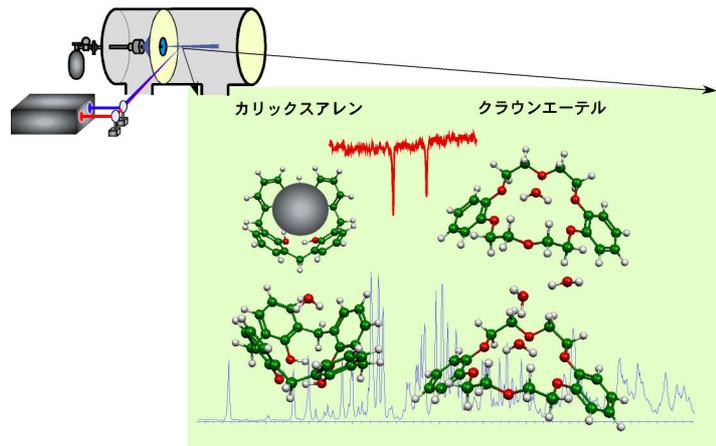
高温超伝導の基本物質である酸化銅のX線ラマンスペクトルの等高線図。斜め成分とX軸に平行な成分とがみられるがそれらは励起電子状態の性質と深く関係している。この二次元マップをxおよびy軸に投影したものが通常の吸収および発光スペクトルであり、X線ラマンスペクトルがそれらを包含するばかりでなくより深い意味を持つことが明らかである。

江幡孝之（広島大院理）

超音速ジェット中に生成した機能性分子のレーザー分光

研究タイトル：
「機能性分子の超音速ジェットレーザー分光
—新しい機能の発見を目指して—」

研究概要：
機能性分子は水素結合などの分子間力で他の原子、分子、イオンを取り込み、その際にその分子特有の化学的性質を発現する。代表的な機能性分子としては、アミノ酸や包接分子、さらには大きな生体分子が挙げられる。我々は機能性分子が他の分子を取り込む仕組みやその構造を、超音速ジェットという分子冷却装置と種々のレーザー分光、および量子化学計算を用いて研究している。講演では、芳香族アミノ酸のコンフォメーション分離と水和構造や、代表的な包接分子であるカリックスアレン、クラウンエーテルの包接構造について、我々の最近の研究成果を紹介する。

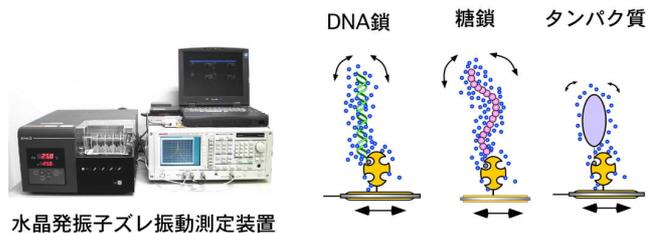


図の説明：
超音速ジェットで生成した機能性分子（カリックスアレン、クラウンエーテル）およびそれらの包接クラスターの赤外・紫外スペクトル。量子化学計算と実験結果から決定した包接構造。

岡畑恵雄（東工大フロンティア創造共同研）

研究タイトル：
「振動現象を利用した生体分子の水和と粘弾性の評価」

研究概要：
27MHzの高周波でズレ振動している水晶発振子基板上に、DNAや糖鎖やタンパク質などの生体分子を固定化すると水の抵抗を受けて分子のズレ振動が影響される。DNA鎖や糖鎖などの細長い分子は水和され多くの水を振っていることがわかった。タンパク質は表面は少し水和しているが比較的硬い分子であることがわかった。



図の説明：
左図の水晶発振子ズレ振動測定装置は水晶発振子測定装置にネットワークアナライザを接続し、周波数スキャンすることにより振動数変化 (ΔF) とエネルギー散逸変化 (ΔD) を同時測定する装置。
右図は水晶発振子の金基板上にDNA鎖や糖鎖やタンパク質を固定化し、振動させたときの生体分子の振動モードを模式的に示している。細長いDNA鎖や糖鎖は柔らかいので水和水と共にズレ振動を起こし(振動のエネルギーが伝わらない)、タンパク質は球状なので比較的硬くほとんどエネルギー散逸しないことがわかった。

腰原伸也（東工大フロンティア創造共同研）

研究タイトル：

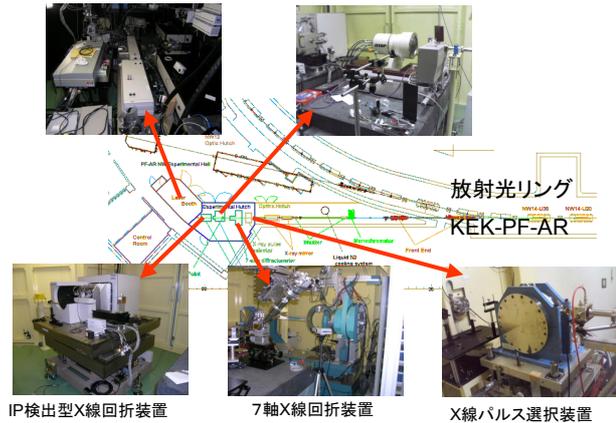
「分子の励起状態と構造ダイナミクスが生み出す新しい機能物質」

研究概要：

光励起状態のような高いエネルギー状態にある凝縮系物質、特に動的に構造が変化したり揺らいだりしている様子を、ナノオンピコ秒スケールの動画として観測する為の新型X線構造解析装置を開発した。この装置はJST,ERATO腰原プロジェクトによって大型放射光光源(KEK-PF-AR)と協力して建設されたものであり、パルスレーザー光の組み合わせ技術によって100-1000億分の1秒の構造変化を、オンピコ秒スケールで動的にとらえることが可能となる、世界で初めての時間分解X線構造解析専用ビームラインである。

放射光と同期した
フェムト秒レーザーシステム

CCD検出型X線回折装置



図の説明：

JST,ERATO腰原プロジェクトによって大型放射光光源(KEK-PF-AR)と協力して建設された世界で初めての時間分解X線構造解析専用ビームラインの概要。

工位武治（大阪市立大院理）

研究タイトル：

「分子スピン量子コンピュータの実現に向けて」

研究概要：

高度なIT社会の到来を前に、日進月歩のコンピュータのチップを微小化する技術にもそろそろ限界が見え始めました。コンピュータの心臓部を小さくして、原子・分子のサイズに近づくと、「0」と「1」ビットの区別がつかなくなり、コンピュータの演算の原理が根本から崩れます。これは、原子・分子の世界は、日常の世界とは異なる自然科学の原理=量子力学が働いているからです。最近、逆に量子力学の原理を使えば、微細化の限界に左右されない新しいコンピュータ(=量子コンピュータ)ができることが理論的に証明されました。量子コンピュータを使えば、今日の最高速のコンピュータを何千台使っても解読に80万年かかる暗号を、4分で解読できます。これは今日の情報社会の崩壊をも意味します。そこで世界中で、理論家は新しい量子暗号や量子テレポーテーションを考案しつつあります。一方、この量子コンピュータを、分子の化学結合に参加していない電子(分子スピン)及び特定の原子核を利用して実現する実験的試みが成功しつつあります。

将来はDNA骨格を利用した、巨大な単一分子中に多数の分子スピンを配列させた量子コンピュータの実現を目指しています。



図の説明：

20年(10年?)後の実用量子コンピュータを目指して誕生した分子スピン量子コンピュータ1号機。分子スピン演算プロセッサは電磁石の中央に置かれ、パルス化されたマイクロ波とラジオ波の存在下、極低温の-271.5 °Cで動作する。

佃達哉 (分子科学研究所)

研究タイトル:
「金クラスターのサイズ選択的合成と構造・物性」

研究概要:

貨幣や装飾品として我々が日常的に目にする「金」を、1ナノメートル(百万分の一ミリメートル)程度まで細かくした超微粒子(クラスター)では、常識を超えた新たな性質が発現することが期待される。金クラスターの様々な物性が構成原子数に応じてどのように振る舞うかを理解することは、ナノスケールの電子デバイスや環境に優しい触媒などの開発を進める上で重要な指針となるであろう。本講演では、金原子の個数を厳密に揃えながらクラスターを合成する方法と、それらが示す光学的・電気的特性や酸化触媒作用について紹介する。



図の説明:

これまでに合成した金クラスター(一例)の構造と物性。クラスターの領域では、バルクの金では見られない物性を示し、構成原子数を少し変えるだけで物性が劇的に変化することがわかった。これらのクラスターは、電子デバイスの構成要素や環境調和型触媒としての応用が期待できる。

山口兆 (大阪大院理)

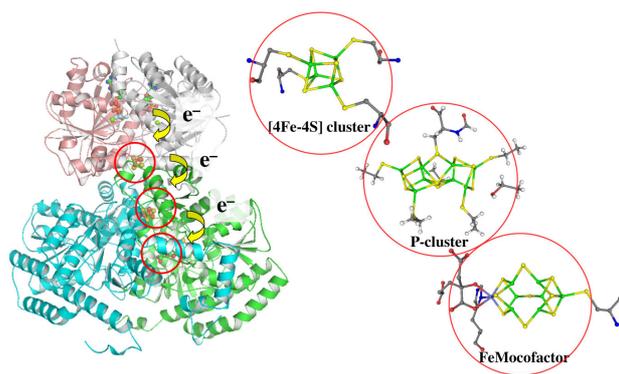
研究タイトル:
「多核遷移金属酵素の電子状態に関する理論的研究」

研究概要:

生体内に存在する酵素は極めて優れた化学反応を行っている。生命が誕生してから40億年が経つが、その間に酵素は化学反応を洗練し続けて来たと考えられる。

我々はその様な酵素の反応機構に興味を持ち、まず初めにニトロゼナーゼ酵素の活性中心について、結合状態や反応機構を高精度な量子力学的取扱で(量子化学計算で)理論解明してきた。

図のように酵素は多くの部品(金属中心)から構成されている。今後は1つ1つの部品の解析だけでなく、システム全体(酵素全体)としての機能を理論的に明らかにする事ができる時代になるだろう。



図の説明:

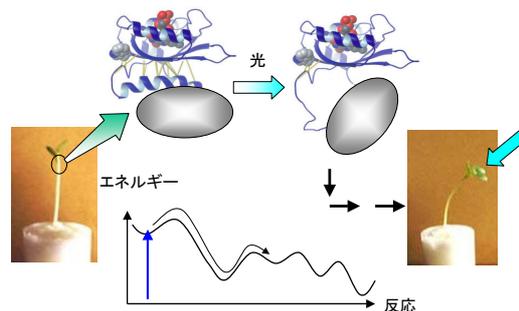
ニトロゼナーゼとその多核金属中心(拡大図)

ニトロゼナーゼは窒素分子をアンモニアに還元する。この反応は多段階で非常に強い還元条件が要求される為、酵素内には多くの多核金属中心が存在している。[4Fe-4S] cluster, P-clusterは電子伝達中心、FeMocofactorは活性中心。

寺嶋正秀（京都大院理）

研究タイトル：
「タンパク質反応解明を目指した生体分子科学研究」

研究概要：
人間を含めてほとんどの生物では、タンパク質が協調的に働いてその生命活動をはぐくんでいる。その活動の分子論的機構を探ることは、単なる分子と生命を分けるものを明らかにすることであるし、また将来的には病気を分子のレベルで治すための基礎となるものでもある。生体分子がどのように構造やエネルギーを変え、どのようにして他の分子を認識して相互作用し、機能を生むのかを分子のレベルで理解するための新しい手法の開発が急務といえる。ここでは、タンパク質の光化学反応機構を時間分解で解明するための新しい分光法の開発と成果について概説する。

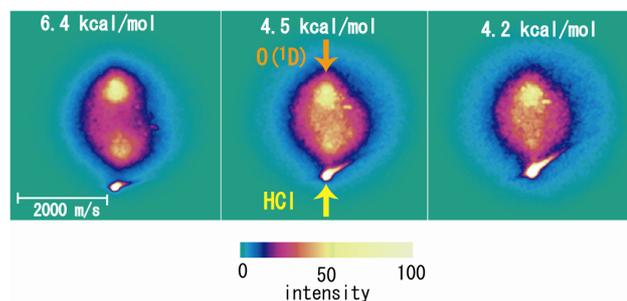


図の説明：
例えば、植物が光の来る方向に曲がる機能を、フォトトロピンというタンパク質の構造変化やエネルギー変化から分子論的に研究しています。

高口博志（理化学研究所）

研究タイトル：
「励起酸素原子の反応ダイナミクス研究」

研究概要：
励起酸素原子はほとんどの安定分子種と高い反応性を持つ重要な化学活性種です。本研究の目的は、この化学反応メカニズムを分子運動レベルで解明することです。私たちはメタン、塩化水素などの反応分子と酸素原子を真空中で衝突させ、生成物の散乱分布を画像観測しました。安定な中間体を一時的に形成するとされていたこれまでの推論に対して、今回の分子衝突実験と理論化学計算によって、短時間で進む高速反応の様子を明らかにしました。

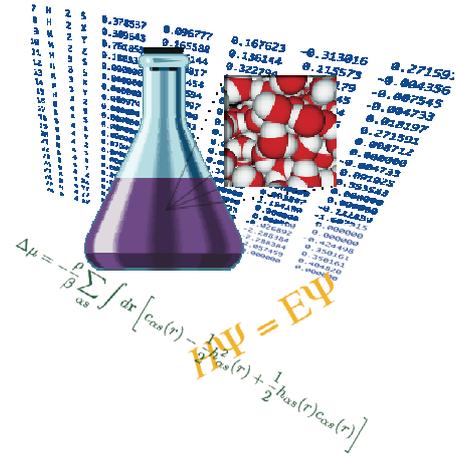


図の説明：
一重項励起酸素原子(O(¹D))と塩化水素(HCl)の衝突から生成された塩素(Cl)原子の散乱分布画像[O(¹D)+HCl→OH+Cl反応]。画面上方から酸素原子が、下方から塩化水素分子が進行し、中央で衝突してできた塩素原子の散乱速度と角度を現している。各測定画像上に示されているのは衝突エネルギー。

佐藤啓文（京都大院工）

研究タイトル：
「溶液内分子の理論化学：量子化学と統計力学
の視点から」

研究概要：
フラスコの水は、膨大な数の分子の集まりである。個々の分子は時々刻々と動き回り、その位置は一見すると出鱈目に思える。しかし実はそうではない。分子の世界を支配するルールは、様々な方程式で表されているのだ。
我々は、方程式を、時には紙と鉛筆で、時にはスーパーコンピュータで扱いながら、机上で化学現象を再現していく。しかし、これは単なる仮想ではない。現実の実験では見えなかった事が明らかとなったり、未見・未知の現象を予測する事さえも可能となる。



図の説明：
独自の着想を反映した方程式の導出はもちろん、これをコンピュータで解くためのソフトウェア開発も重要である。しかし、いずれにせよコンピュータは膨大な数字の羅列であるデータを出力するにすぎない。このデータの中から、潜んでいる化学現象の本質を見つけ出すのだ。