

領域略称名：柔らかな分子系
領域番号：2503

平成27年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る中間評価報告書

(研究領域名)

「理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学」

(領域設定期間)

平成25年度～平成29年度

平成27年6月

領域代表者

(国立研究開発法人理化学研究所・田原分子分光研究室)

主任研究員・田原 太平

目 次

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	5
2. 研究の進展状況	7
3. 審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況	10
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	12
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	15
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	21
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	23
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	24
9. 総括班評価者による評価	25
10. 今後の研究領域の推進方策	27

研究組織

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関・部局・職	構成員数
X00	25104001 理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学	平成25年度～平成29年度	田原 太平	国立研究開発法人理化学研究所・田原分子分光研究室・主任研究員	5
A01計	25104002 原子解像度で探る巨大分子・分子集合体の柔らかさと機能の関係	平成25年度～平成29年度	北尾 彰朗	東京大学・分子細胞生物学研究所・准教授	1
A01計	25104003 溶液・高分子系界面の構造および機能の理論解析	平成25年度～平成29年度	森田 明弘	東北大学・理学研究科・教授	4
A01計	25104004 柔らかな分子がもたらす触媒活性の理解と設計	平成25年度～平成29年度	林 重彦	京都大学・理学研究科・教授	1
A02計	25104005 先端的な超高速分光と非線形分光による多自由度複雑分子系の研究	平成25年度～平成29年度	田原 太平	国立研究開発法人理化学研究所・田原分子分光研究室・主任研究員	4
A02計	25104006 分子機能を生み出す柔らかさの時間分解観測とその発現機構解明	平成25年度～平成29年度	水谷 泰久	大阪大学・大学院理学研究科・教授	3
A02計	25104007 高度化した一分子蛍光計測によるタンパク質の構造形成運動の解明	平成25年度～平成29年度	高橋 聡	東北大学・多元物質科学研究所・教授	4
A02計	25104008 気相分光による水素結合系の構造多様性と水和ダイナミクスの解明	平成25年度～平成29年度	藤井 正明	東京工業大学・ソリューション研究機構・教授	4
A03計	25104009 光応答性タンパク質の機能転換が明らかにする柔らかな構造機能相関	平成25年度～平成29年度	神取 秀樹	名古屋工業大学・工学研究科・教授	4
A03計	25104010 柔らかな連続多点配位性を持つ有機多核金属複合体の創成	平成25年度～平成29年度	村橋 哲郎	東京工業大学・大学院理工学研究科・教授	2
A03計	25104011 精密分子設計による光応答を指向した超分子材料の開拓	平成25年度～平成29年度	中西 尚志	国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・独立研究者	2
計画研究 計11件					
A01公	26104501 タンパク質モーターによるオルガネラ輸送への非平衡統計力学関係式の応用	平成26年度～平成27年度	林 久美子	東北大学・工学研究科・助教	1
A01公	26104503 局所的らせん柔構造を有する新規な光機能性分子素子の理論設計	平成26年度～平成27年度	天辰 禎晃	秋田大学工学・資源学研究科・准教授	1
A01公	26104511 柔らかく蛋白質のアロステリーを水和効果を含む自由エネルギー地形解析から探る	平成26年度～平成27年度	櫻井 実	東京工業大学・バイオ研究基盤支援総合センター・教授	1
A01公	26104515 生体関連分子と水の複合的な分子間相互作用による振動スペクトル強度・形状の理論解析	平成26年度～平成27年度	鳥居 肇	静岡大学・教育学部・教授	1

A01 公	26104517 柔らかいタンパク質・DNA分子認識のマルチスケール計算研究	平成26年度～平成27年度	高田 彰二	京都大学・理学研究科・教授	1
A01 公	26104519 柔らかい不斉触媒を用いる水中での高立体選択的反応の機構解明	平成26年度～平成27年度	畑中 美穂	近畿大学・理工学部・助教	1
A01 公	26104522 第一原理計算を用いた分子動力学法の開発と界面への応用	平成26年度～平成27年度	大戸 達彦	大阪大学・基礎工学研究科・助教	2
A01 公	26104526 チャンネルロドプシンのイオン輸送の理論化学	平成26年度～平成27年度	吉田 紀生	九州大学・理学研究院・准教授	3
A01 公	26104531 ヒストンテールのしなやかさに由来する動的挙動の解明	平成26年度～平成27年度	淵上 壮太郎	横浜市立大学・生命医科学研究科・助教	3
A01 公	26104535 X線回折散乱実験と分子シミュレーションを用いた生体分子の動的構造の解析	平成26年度～平成27年度	笠口 友隆	慶應義塾大学・理工学部・助教	1
A01 公	26104538 有機金属複合体など凝縮重電子系複合体の光反応の理論的研究	平成26年度～平成27年度	倉重 佑輝	分子科学研究所・理論・計算分子科学研究領域・助教	1
A02 公	26104502 マルチ励起光を用いた能動的測定による準安定状態にある分子系の研究	平成26年度～平成27年度	吉澤 雅幸	東北大学・理学研究科・教授	1
A02 公	26104504 全内部反射ラマン・振動SFG光システム構築と固液界面への応用	平成26年度～平成27年度	石橋 孝章	筑波大学・数理物質系・教授	3
A02 公	26104507 金ナノロッドを用いた分子モーター構造ダイナミクス的高速1分子計測	平成26年度～平成27年度	飯野 亮太	岡崎統合バイオサイエンスセンター／分子科学研究所・教授	1
A02 公	26104513 固体高分解能NMRを用いた細胞膜中で機能する光受容膜タンパク質の構造解析	平成26年度～平成27年度	川村 出	横浜国立大学・工学研究院・准教授	1
A02 公	26104514 高速原子間力顕微鏡を用いた1分子操作と構造ダイナミクス制御	平成26年度～平成27年度	内橋 貴之	金沢大学・理工研究域・准教授	1
A02 公	26104527 生体巨大分子の組み合わせが形成する制限された水和空間での蛋白質の構造転移とその制御	平成26年度～平成27年度	関谷 博	九州大学・理学研究院・教授	2
A02 公	26104532 酵素反応追跡のためのピコリットルインクジェットによる新規高速混合器の試作	平成26年度～平成27年度	小倉 尚志	兵庫県立大学・生命理工学研究科・教授	2
A02 公	26104533 広い時間領域にわたる時間分解赤外円偏光二色性分光法による構造変化方向の直接観測	平成26年度～平成27年度	坂本 章	青山学院大学・理工学部・教授	3
A02 公	26104534 発色団とタンパク質の選択的結合と励起緩和動力学:超高速近赤外振動分光による計測	平成26年度～平成27年度	高屋 智久	学習院大学・理学部・助教	1

A02 公	26104539 分子クラスターの振動コヒーレント制御による分子間相互作用ダイナミクスの研究	平成26年度～平成27年度	水瀬 賢太	東京工業大学・理工学研究科・助教	2
A02 公	26104540 非接触原子間力顕微鏡による柔らかな分子系の超解像度イメージング技術の確立	平成26年度～平成27年度	清水 智子	材料研究機構・極限計測ユニット・主任研究員	1
A03 公	26104508 プロリン型の非天然アミノ酸の柔らかいアミド結合に基づいた規則構造制御	平成26年度～平成27年度	尾谷 優子	東京大学・薬学系研究科・助教	1
A03 公	26104509 アゾ基の構造ダイナミクスを利用した蛍光プローブの創製	平成26年度～平成27年度	花岡 健二郎	東京大学・薬学系研究科・准教授	1
A03 公	26104510 ねじれた π 共役分子をモジュールとする機能性材料の創製	平成26年度～平成27年度	中野 幸司	東京農工大学・工学部・講師	2
A03 公	26104520 蛋白質の捕捉と酵素活性のスイッチングの二面性を有するRNAの動作原理の解明と活用	平成26年度～平成27年度	片平 正人	京都大学・エネルギー理工学研究所・教授	2
A03 公	26104521 伝導性高分子鎖のエントロピー制御に最適な分子設計と合成	平成26年度～平成27年度	寺尾 潤	京都大学・工学研究科・准教授	1
A03 公	26104523 柔らかなタンパク質反応場を利用した立体選択的金属酵素の論理的開発	平成26年度～平成27年度	大洞 光司	大阪大学・工学研究科・助教	2
A03 公	26104524 光・電子過程を内包するメタロセン系イオン液体の開発と動的挙動の解析	平成26年度～平成27年度	持田 智行	神戸大学・理学研究科・教授	1
A03 公	26104525 柔らかな分子系としてのポリ(置換メチレン)の応用に関する研究	平成26年度～平成27年度	井原 栄治	愛媛大学・理工学研究科・教授	1
A03 公	26104528 巨大な外場応答を示す柔らかな分子結晶の開発	平成26年度～平成27年度	佐藤 治	九州大学・先端物質研究所・教授	1
A03 公	26104529 フォトン・アップコンバージョンを示すイオン液体の創出	平成26年度～平成27年度	楊井 伸浩	九州大学・工学研究院・助教	1
A03 公	26104537 光応答性分子結晶の構造変化による固体物性制御	平成26年度～平成27年度	森本 正和	立教大学・理学部・准教授	1
A03 公	26104541 非平面共役分子の動的解析に基づく組織化法の開発	平成26年度～平成27年度	中西 和嘉	物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクニクス研究拠点・研究者	1
公募研究 計 34 件					

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ程度）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

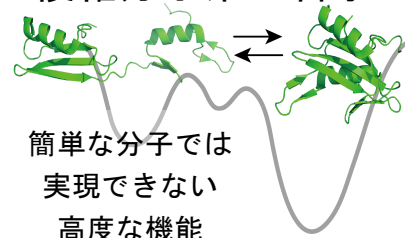
（1）研究の学術的背景 着想に至った経緯

物質科学は20世紀において驚異的な進歩を遂げ、われわれの生活は前世紀とは比較にならないほど豊かになった。その一方、人類の活動の急速な増大によって多くの資源がきわめて速い速度で消費されるようになり、今、現在の水準を保ったまま持続可能な社会を実現することが急務となっている。その意味でこれまでの物質科学はその限界を見せ始めている。

一方、分子生物学の誕生によって始まった生命科学の革新は、を多様な生物を整理する博物学から、生命活動を分子現象として理解しようとする先端科学へと変貌させた。これによって生命を複雑かつ驚異的な機能を実現する多数の分子からなる一つの系として理解しようとする視点が形成されたが、これは、原子・分子単体の理解からボトムアップ的に発展してきた物質科学にも大きな刺激を与えることになった。なぜなら、生命活動あるいはその要素現象は極めて複雑にも関わらず、常温下で大きなエネルギーも必要とせず、極めて特異的に進行する究極の効率を持った分子過程であるからである。つまり、物質科学の一つの究極の目標として、生命に象徴されるような**複雑系の理解、制御、利用の重要性**が意識されるようになった。

これらを背景に、分子科学とその関連分野を統合した複雑系研究（複雑分子系の科学）が最も重要な問題であるという考えに至り、本研究課題を申請するに至った。

大きな自由度を持つ 複雑分子系の科学



生物学

（2）領域の新規性

生体分子系に象徴される高い機能を発現する**複雑分子系の本質**は、内部自由度が極めて大きく、系が必要に応じて柔軟に変化し最適な機能を発現できるという点である。これは分子科学の言葉で言うならば、極めて近いエネルギーを持つ多くの準安定状態が存在し、その間を分子が常温下で自由に行き来していることに他ならない。このような**複雑系の自由さ**、いわば「**柔らかさ**」の理解と制御は、これからの分子の学問の中心的問題であるが、未だほとんど開拓されていない。

（3）研究期間内でどこまで明らかにするのか

分子系の「柔らかさ」の研究は、多体問題である複雑な現実系をどうやって分子論的に理解し、制御するかという研究に他ならない。同時にこれは広い時間・空間スケールにまたがる分子系の時空間挙動をどのように総合的に解明するかという問題である。なぜなら、このような複雑系では、フェムト秒領域で行われた刺激がどのようにミリ秒領域での大きな分子応答につながるかという 10^{12} 乗にも渡る時間スケールでの分子の階層運動を理解することが本質的であり、またこれは同時に数個の分子の量子状態の変化が 10^{23} 個オーダーの分子の集団運動にいかにつながるかという問題だからである。従ってこの問題を解明するためには、広い時間・空間スケールを縦断する、分子的視点に立脚した機能解析と機能制御の研究を行うことが本質的なのである。このような複雑分子系の問題に正面から挑戦することはこれまでほとんど夢物語であったが、今、ようやくこれに正面から取り組む好機が訪れたと言える。なぜなら、研究推進に必須な要素である、理論、計測、制御の3つのそれぞれにおいて近年長足の進歩があり、三つ巴になった研究推進が可能な状況になりつつあるからである。

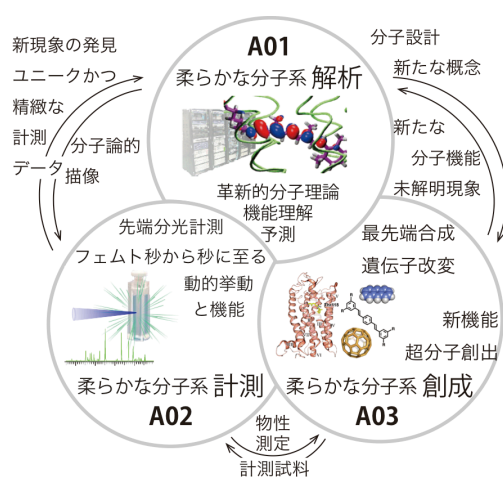
そこで本領域では分子科学、生物物理学、合成化学、理論・計算化学の叡智を集め、超高速計算機の開発を背景にした革新的な分子理論による理解と予測、超高速分光や単一分子計測に代表され

る最先端計測による現象観測、合成化学や遺伝子工学を駆使した機能変換・創成を協奏的に行い、理論と実験を融合させた新しい学術領域である「柔らかな分子系の科学」を創出する。

A01 柔らかな分子系解析項目においては、分子系が柔らかさを活かして機能を発現する過程を理論計算によって解析する。量子力学・分子力学とそれらのハイブリッドモデルを用いて、広い時空間で原子解像度のシミュレーションを行い、複雑分子系の構造変化と分子機能の定量的解析および予測を実現する。生体分子系や超分子系においては構造形成・分子認識・触媒反応における、柔らかさと機能の関係性を明らかにする。また、溶液・高分子系・生体膜に代表される柔らかい界面の物質移動や反応場としての機能を解明する。A02 項目の実験結果を元に理論計算の検証・改良を行い、より定量性の高い計算を実現し、A03 項目と連携して機能・構造の予測と分子設計を行う。

A02 柔らかな分子系計測項目においては、分子系のもつ多様な準安定構造とそれらのダイナミクスを計測する手法を開発し、柔らかさに基づく分子現象を観測し、それと機能発現との関係を明らかにする。独自の最先端計測法を最大限に活用し、超分子、自己組織化集合体、タンパク質およびポリペプチドを始めとする複雑分子系の機能発現の機構や構造形成過程の過渡的構造とそのダイナミクスを理解する。また、界面など不均一系の分子レベルの構造、物質移動や反応場としての機能を調べる。観測された分子構造の動的性質と分子機能との関係を A01 項目および A03 項目と連携し解明する。

A03 柔らかな分子系創成項目においては、合成化学・遺伝子工学を駆使して、柔らかさを有する分子系である超分子やタンパク質の新たな機能を創成する。超分子系においては例えばビルディングブロック分子の自己組織化により新しい集合体構造から新規機能を発現させる。生体分子系では遺伝子工学的手法を駆使して機能の改変・転換を行う。これらの研究を戦略的に進めるためには、複雑分子系の構造とダイナミクスを深く理解することが不可欠であり、A01 項目の理論計算、A02 項目の先端計測と連携することによって、独創的な機能の創成を実現する。



(4) 研究対象と本新領域の発展への取り組み

提案する新学術領域は、分子科学、理論・計算化学、合成化学、生物物理学という異なる分野で世界トップのアクティビティを有する我が国の研究者を連携し、狭い学問分野の枠を打破して新しい融合領域の創成と広い視野に立った学術推進体制を作ることを目指すものである。また、次のステップの物質科学を担う多様な研究者が強く相互作用することで、物質科学とその関連分野に新しい方向性を示さんとするものである。さらに、この新学術領域推進における異分野の融合と研究の先鋭化を通して、新しく広い視野を持った次世代の研究者を育成し、将来の我が国の学術の発展へとつなげる。

(5) 本領域の発展による学術水準の向上・強化

当該領域の研究の発展は化学だけにとどまらず、物質科学に関連する物理学・計算科学・生物科学・医科学など広い研究領域の発展に大きく貢献する。すでに日本化学会が中長期テーマとして「複雑系の化学」を取り上げており、複雑系の本質に迫る本新学術領域による学術水準の向上・強化が極めて重要であることは広く認知されている。主要メンバーはすでに国際的に高い評価を受けており、それらがベクトルを一にした動きを起こすことで、新しい潮流を世界に向けて我が国から発信することができる。これは科学立国を標榜する我が国にとって極めて重要なことである。さらに、計算機を背景とする理論と実験の協奏から得られる知的基盤は物質科学のみならず創薬、医学を含めた広い分野に対して大きな波及効果が期待される。

2. 研究の進展状況〔設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する〕（3 ページ程度）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らして、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

本領域では分子科学、生物物理学、合成化学、理論・計算化学の叡智を集め、超高速計算機の開発を背景にした革新的な分子理論による理解と予測、超高速分光や単一分子計測に代表される最先端計測による現象観測、合成化学や遺伝子工学を駆使した機能変換・創成を協奏的に行い、理論と実験を融合させた新しい学術領域である「柔らかな分子系の科学」を創出することを目指している。既に *Nature*, *Nat. Chem.*, *Nat. Commun.*, *PNAS*, *JACS*, *Angew. Chem.* などに原著論文 283、*Chem. Rev.* 3 を含む総説・解説 77、国際会議の招待講演 139 の発表を行うなど、順調な研究成果を挙げている。

A01 柔らかな分子系解析項目

この項目においては、分子系が柔らかさを活かして機能を発現する過程を理論計算によって解析している。量子力学・分子力学とそれらのハイブリッドモデルを用いて、広い時空間で原子解像度のシミュレーションを行い、複雑分子系の構造変化と分子機能の定量的解析および予測を実現するため研究を遂行している。林重彦が開発した QM/MM RWFE-SCF 法は、タンパク質構造緩和を考慮した化学反応性解析を可能にした。林はこの方法を用いてロドプシンの色変異体の理論的設計をおこない、実際にこれによって短波長シフトが得られることを A03 須藤などの実験研究者が実証した。北尾は、カスケード的に並列シミュレーションを展開していくことで、効率的に柔らかな構造変化を観測できる PaCS-MD 法を開発した。公募研究では、鳥居は水和ヘリックスにおけるアミド I モードの振動数シフトの水分子角度位置依存性を再現する静電相互作用モデルを構築した。また、林久美子は揺らぎの定理を応用した理論を開発して回転タンパク質モーターの研究に利用しており、高田は配列依存的な柔らかさを再現できる新しい粗視化 DNA モデルを開発してタンパク質・DNA の分子認識研究に応用している。

生体分子系や超分子系においては構造形成・分子認識・触媒反応における、柔らかさと機能の関係を解明に取り組んでいる。林重彦は A03 吉沢と共同し、疎水性ゲスト分子の包接過程の分子動力学計算 (MD) によって自発的な包接を再現することに成功し、包接構造が非常に柔軟に変化するという新概念「動的包接」を見出した。北尾は、イオンチャネル TRPV1/4 の研究で、脂質の結合が TRPV4 のチャネルの開閉や病気に関係しており、また TRPV1 の大きな構造変化を引き起こすことを明らかにした。細菌べん毛のプロトン透過装置の研究では、プロトンが H_3O^+ として透過することでラチェット運動を生み出すというメカニズムを明らかにし、京コンピュータを用いた細菌べん毛繊維の構造多型変換の研究も進めている。公募研究では、吉田が 3D-RISM 理論と MD と組み合わせることでチャンネルロドプシンのイオン透過経路を解明し、淵上はイオンモビリティ質量分析と MD を組み合わせることでヒストン多量体の構造多様性を解析している。また、櫻井が粗視化モデルによる ABC トランスポーターの柔らかさの役割を明らかにし、笠口は X 線溶液散乱や MD 等を用いたタンパク質の機能的運動を研究している。

溶液・高分子系・生体膜に代表される柔らかい界面の物質移動や反応場としての機能を解明している。森田は水溶液界面の和周波分光 (SFG) の理論を国際的に先導しているが、開発した汎用 SFG 計算プログラム Calnos は高い並列化と高速化を達成し、塩基性水溶液や氷表面の構造とスペクトルを解明する成果を生み出した。また A02 田原と強く連携を推進している。公募研究では、大戸が MD・第一原理 MD を用いて界面の研究に取り組み、酸化チタン表面近傍の水のダイナミクスを明らかにした。

これ以外に、公募研究では、倉重が多参照理論と密度行列繰り込み群法を融合させた独自の方法を用いて、有機結晶や金属複合体など複合体の励起ダイナミクスの解析を進めている。また、畑中が柔らかな構造を持つ錯体の不斉触媒の化学反応や発光・消光の仕組みを明らかにしている。更に天辰が

メチレン鎖架橋の柔軟性を利用した分子回転モーターの理論設計を行っている。このように公募研究によって、計画研究では十分カバーできなかった分子系や量子化学計算の研究が十分補われている。また A01 内だけでなく他の項目との理論—実験の共同研究が活発に進行しており、一部が論文発表にまで至るなど花を開きつつある。現在までの共同研究は、A02 と 26 件、A03 と 27 件と順調である。

A02 柔らかな分子系計測項目

この項目においては、独自の最先端計測手法から得られるユニークかつ精緻な計測データに基づいて、複雑系のもつ多自由度と機能発現との関係を解明する研究を推進している。

タンパク質は柔らかさが機能を生む典型的な系であり、動的特性と機能との相関を明らかにする研究が活発に行われている。水谷はガス結合タンパク質および光駆動イオン輸送タンパク質について、機能部位間の連動的な構造ダイナミクスおよび分子内エネルギーフローの時間分解共鳴ラマン分光法による詳細な観測を行い、機能発現機構の解明を行った。田原は、世界最高の分光計測技術を駆使し、多くの光受容タンパク質の反応初期ダイナミクスを解明した。また、新たに開発した二次元蛍光寿命相関分光法によって DNA およびタンパク質のマイクロ秒構造揺らぎの可視化に成功した。高橋は、タンパク質のフォールディング運動や機能運動を解明するための高速一分子時系列測定手法を開発し、プロテイン A の B ドメインの動的特性を解明した。また、粒子の蛍光特性に基づいて選別する新しい一分子ソーターの開発に成功した。公募研究では、飯野が金ナノロッドの高速配向イメージング法を開発し、モータータンパク質の化学反応素過程の時定数や発生するトルクを計測することに成功した。川村は *In-situ* 光照射固体 NMR 法によって、真正細菌が持つ光センサータンパク質の複数の中間体の発色団構造を解明した。内橋は高速 AFM を用いてモータータンパク質の機能する過程を一分子観測し、機能発現機構について調べた。また、タンパク質の構造制御にむけてインタラクティブモード高速 AFM の高機能化を図った。小倉はタンパク質の反応ダイナミクス観測にむけてピコリットルレベルの液滴による高速混合装置の開発を行った。

柔らかな分子のつくる界面は、化学・生物学・物理学と幅広い領域に関わる重要な分子系でありながら、計測の難しさからその分子論的理解はいまだ進んでいない。田原は世界をリードする界面選択的分光計測手法を用いて、脂質界面の pH がバルクと顕著に異なることを発見し、また 19 世紀以来の謎であるホフマイスター塩効果に関して新しい機構の提唱を行った。公募研究では、石橋は固液界面の観測にむけて、マルチプレックス方式のヘテロダイナミクス検出キラル振動 SFG 分光装置を開発し、位相情報を含めてキラル振動 SFG 信号を測定可能にした。さらに電子共鳴増強効果による高感度化を達成した。清水はマルチパス走査法により高解像度 AFM 像を取得することに成功し、固体表面への分子の吸着状態について詳細な情報を得た。

液体、あるいは気相中の分子クラスターなど分子集合体の構造変換に関する研究も進んでいる。藤井は多重共鳴レーザー分光法によってペプチドおよびその複合体の単一コンフォマー観測を行った。加えて、水和クラスターでの水和構造転換過程の解明に初めて成功し、準安定構造の精密決定および構造間のダイナミクスを明らかにした。関谷は、ポリマーのコイル—グロビュール転移を観測し、分子の混み合い効果について調べた。坂本は赤外円偏光二色性分光法と量子化学計算を組み合わせ、光学活性分子の構造と絶対配置について調べた。高屋は時間分解近赤外分光法を用いて、複数の電子励起状態におけるカロテノイドの分子構造を明らかにした。吉澤は励起波長変調フェムト秒誘導ラマン分光装置を開発し、 β -カロテンの電子励起状態における高振動準位のスペクトル観測を行った。水瀬はインパルス誘導ラマン散乱による分子クラスターの分子間振動励起法および超高速分子ダイナミクスの可視化に向けた新規イメージング装置を開発した。

上に述べた単独の研究グループによるものだけでなく、領域内の共同研究も活発に行われている。A01 項目との 26 件の連携では、理論計算と直接比較しうる精緻な計測データを得ることによって、実験と理論が一体となった研究が新しく生まれている。また、A03 項目との 43 件の連携では、新たに創成された複雑分子系の性質と機能を、新規計測法を用いて明らかにする研究が進んでいる。

A03 柔らかな分子系創成項目

この項目においては、合成化学・遺伝子工学を駆使して、柔らかさを有する分子系である超分子やタンパク質の新たな機能を創成することを目指しており、超分子系、生体分子系などについてこれまでに以下のような研究の進展が見られている。

超分子系では、**村橋**は不飽和炭化水素類が多数の金属原子を集合させることを発見しているが、核数選択的な金属の導入法を開発するとともに、連続 π -配位結合の組換え挙動を明らかにした。**中西尚志**は合理的設計・精密合成により多彩なサイズや次元性を持った有機 π 共役系化合物を創成しているが、液状アルキル化フラーレンを用いた新規自己組織化技法を開発し、液状ピレンの発光性に関するメカニズムを明らかにした。**吉沢**（分担）は様々な包接化合物を生み出しているが、ナノカプセルの分子内包能と光遮蔽および圧縮効果を利用してラジカル開始剤の光および熱安定化に成功するとともに、剛直な分子チューブによる柔軟な“ひも状”生体分子の識別を実現した。**中野**はらせん状の構造をもつねじれた π 共役分子ヘリセンをモジュールとする機能性材料の創製を試み、高い蛍光量子収率をもった光学活性分子の合成に成功した。**寺尾**は伝導性高分子鎖のエントロピー制御に最適な分子設計と合成を試み、炭素共役系に匹敵する高い分子内電荷移動度を有する金属被覆型分子ワイヤの合成に成功した。**持田**は光・電子過程を内包するメタロセン系イオン液体の開発と動的挙動の解析を目指した結果、多段階レドックス系分子の創製に成功した。**井原**は柔らかな分子系としてのポリ（置換メチレン）の応用に関する研究を行い、主鎖の周囲にピレンを適切に集積させることによりその光物性を制御できる可能性を明らかにした。**楊井**は分子が集積化することでフォトン・アップコンバージョンを示す新しい現象を見出し、理論との共同研究によってそのメカニズムを解明した。**中西和嘉**は非平面共役分子の動的解析に基づく組織化法の開発を行い、新しい集積構造を持った分子系を創成するとともに気水界面で力学的なビナフチルの構造制御に成功した。

生体分子系では、**神取**は光駆動ナトリウムポンプの構造機能相関の解析により輸送モデルを提唱するとともに、天然に存在しないカリウムポンプの創成に成功した。**須藤**（分担）はアミノ酸変異によりプロトンポンプをプロトンチャンネルに機能転換した。**尾谷**はプロリン型の非天然アミノ酸の構造制御を試みた結果、アミド結合の柔らかさを制御することが可能であることを示唆した。**花岡**はアゾ基の構造ダイナミクスを利用した蛍光プローブの創製を目指した結果、低酸素環境検出のための新たな蛍光プローブとして芳香族アゾ化合物が有望であることを明らかにした。**片平**は蛋白質の捕捉と酵素活性のスイッチングの二面性を有する RNA の動作原理の解明と活用に取り組み、抗 HIV 活性を有するタンパク質の触媒活性のメカニズムを明らかにした。**大洞**はタンパク質反応場を利用した立体選択的金属酵素の論理的開発を目指し、特異な触媒活性をもった人工金属酵素の創製に成功した。

また A03 では、一見柔らかさと相容れないような分子結晶を対象とした研究も公募研究で行い、柔らかさに基づく機能を生み出している。**佐藤**は巨大な外場応答を示す柔らかな分子結晶を研究し、分子の配向変化がマクロな機械的機能に変換される柔らかいニッケル錯体結晶を開発するとともに、スピン量子数が世界最高値を示す籠型鉄 42 核錯体の開発に成功した。**森本**は光応答性分子結晶の構造変化による固体物性制御を目指した結果、新たな蛍光スイッチ機能を見出した。

このような単独の研究だけでなく領域内の共同研究も活発に行われており、新規機能に対する理論研究により A01 とは 27 件、新たに創成した分子系に対する計測研究により A02 とは 43 件の共同研究が進んでいる。

上記の通り、すべての項目で応募時に研究領域として設定した研究の対象の研究が予定通り進んでいる。また公募研究も順調に進行している。更に、計画研究だけでなく公募研究を交えた共同研究が着実に実を結びつつあり、既に多くの成果を挙げている。

3. 審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況（2 ページ程度）

審査結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

以下に指摘事項とその対応を説明する。

・「柔らかな分子系」という言葉の定義が広いため、各研究計画において統一されていない印象を受ける。

内部自由度が極めて大きく、系が必要に応じて柔軟に変化し最適な機能を発現できる複雑分子系を我々は「柔らかな分子系」として定義し、このような複雑系の自由さ、いわば「柔らかさ」の理解と制御を目指している。領域をスタートさせるまでに「柔らかさ」とは何かを計画班員の間で繰り返し議論した。その過程で「分子系の柔らかさ」に対する考え方について研究者の間でも差異がある可能性が認識されたため、「柔らかさ」とは何かを問い続けることの重要性を 10 名の計画班員の間で認識しあった。その意味では審査結果の所見はある程度、予想されていたことであるが、我々は「分子系の柔らかさ」の共通理解を目指すため、本領域で以下のような試みを行ってきた。

第 2 回全体合宿会議（平成 25 年 12 月、長浜）で全員の発表に「分子の柔らかさ」に対する考えを述べてもらい、それを合宿中の討論材料として計画班員の考えの統一を図った。

国際評価委員である Straub 博士、Sheves 博士、国内評価委員である北川先生をお招きした第 1 回ワークショップ（平成 25 年 12 月、諏訪）では、領域の目指すものを十分に理解していただくため、ワークショップのタイトルを”What is soft molecular system?”として領域代表と班長が説明をした上で、深夜に至るまで「柔らかさ」をキーワードとして十分な議論を行った。第 2 回ワークショップとして開催した若手ワークショップ（平成 26 年 3 月、名古屋）においても、大学院生を含む若手研究者が「自分の研究において分子の柔らかさ」とは何かについて意見交換した（写真右）。



さらに 34 名の公募班員が加わっての最初の会合となった第 3 回全体合宿会議（平成 26 年 6 月、北杜）では、すべての班員が自己紹介のショートプレゼンテーションの中で「柔らかさをどう考えるか」についてそれぞれの見解を披露した（写真下）。



平成 26 年度に開催されたワークショップでは、その内容はタンパク質の折畳み、和周波分光、光機能分子、超分子・高分子、自由エネルギー計算、と多岐にわたったが、ワークショップ内においては常に「柔らかさ」をどう捉えるか、どう考えるかについての意見交換を行った。

生体分子や超分子が機能を発現するためには、分子構造を自在に変化させる「柔らかさ」が重要である一方、構造を維持するような「硬さ」の役割も認識されるようになってきた。本領域では 100 件を超える共同研究が進行しており、今後、それぞれの班員が各自の研究や共同研究の中で「分子系の柔らかさ」をどのように制御するのか、理論・計測・創成というそれぞれの立場から理解が深まると考えている。

このように領域メンバーの理解は、さまざまな取り組みを通して自律的に統一に向かっていると考えている。

・研究項目 A1 の研究計画代表者の偏りや A03 の計画研究の対象とする分子群が広範である点は公募班で補うのが望ましい。

我々はこの指摘を受けて公募班の選考に臨み、以下のように十分に対応することができた。

A01 の計画研究代表者の用いている手法は、分子力学 (MM) や分子動力学 (MD)・量子化学 (QM) とそれらを組み合わせた QM/MM であるが、高田と櫻井が MM より解像度を落とした粗視化モデルを主に用いているほか、林久美子が揺らぎの定理を応用した理論を開発しており、更に瀧上が MD とイオンモビリティ質量分析を、笠口が MD と X 線溶液散乱を、吉田が MD を液体の統計力学理論 (3D-RISM) と組み合わせるなど、**公募研究 11 名のメンバーのうち 6 名が手法的に新しい方法を導入し、加えて実験との連携を強化している。**

また計画研究がカバーする分野は生体分子系・超分子系・溶液・高分子系・生体膜であるが、公募研究では畑中がランタノイド化合物を中心とした柔らかな不斉触媒の高い立体選択性を研究しているほか、倉重が多参照理論と密度行列繰り込み群法を融合させた方法によって有機結晶や金属複合体などの励起ダイナミクスの解析を進め、さらに天辰がメチレン鎖架橋の柔軟性を利用した分子回転モーターの理論設計を行っているなど、計画研究では十分カバーできなかった新しい分子系の研究が加わり、更に大戸も加えた計 4 名によって**量子化学計算を用いた研究が強化された。**

一方、A03 については審査結果の所見で指摘された通り、計画研究代表者の分野は生物物理学、有機錯体化学、超分子化学と分子群が広範であり重なりはほとんどない。そこで公募班員の選考にあたって、**広範な分野を緩やかな重なりによりカバーすることを配慮した。**

その結果、超分子系では機能性材料化学の中野、導電性高分子化学の寺尾、光機能性高分子の井原、金属錯体の持田、ホストゲスト化学の楊井、構造有機化学の中西和嘉が加わり、計画班員の村橋、中西尚志・吉沢と合わせて 8 グループとなった。錯体化学の長谷川も班友として加わり、合成化学を基盤として新たな機能創成を担う「柔らかな分子系」の強力なグループを構成することができた。

生体分子系では構造有機化学の尾谷、ケミカルバイオロジーの花岡、核酸化学の片平、人工金属酵素の大洞が加わり、計画班員の神取・須藤と合わせて 5 グループとなった。タンパク質機能デザインの廣田、タンパク質科学の新井も班友として加わり、遺伝子改変などを基盤として生体関連分子の機能創成を担う「柔らかな分子系」の強力なグループを構成することができた。

また分子結晶についても、機能性分子結晶の佐藤、フォトクロミック結晶の森本を公募班員として選出し、当初、「柔らかな分子系」の範疇に入らないと考えられた分子系にも研究が広がった。

このように A03 で機能創成に挑む計画および公募のグループは合計 15 グループとなり、全体として広範な領域をカバーし、学際研究を行う基盤が形成されている。

これらの公募班メンバーは強いシナジー効果を産んで従来では考えられない共同研究が生まれている。例えば A01 の倉重と A03 の楊井は、楊井が発見した分子集合由来のフォトン・アップコンバージョンという新現象を倉重の理論計算により解明することで、共同研究の開始から 1 年以内に *Angew. Chem.* に論文を発表することができた。その他にも公募班員同士の連携は始まっており、創成と理論に関しては、A03 尾谷は A01 鳥居と、A03 中野は A01 倉重と、A03 片平は A01 高田と、A03 寺尾は A01 大戸と、A03 井原は A01 畑中と共同研究を開始している。創成と計測に関しては、A03 花岡は A02 吉澤と、A03 中野は A02 吉澤、坂本、清水と、A03 片平は A02 内橋と、A03 大洞は A02 小倉、清水と、A03 井原は A02 吉澤、高屋と、A03 佐藤は A02 小倉と、A03 中西和嘉は A02 石橋と共同研究を開始している。これらの共同研究により、本領域ならではの新しい成果が生まれようとしている。

4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

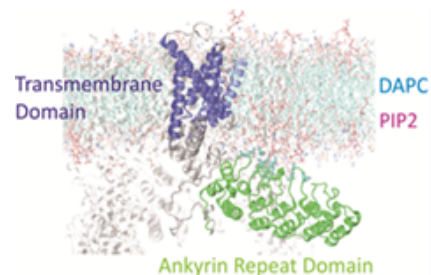
(3 ページ程度)

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。

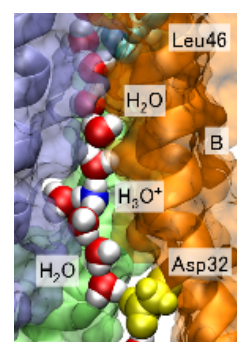
A01 柔らかな分子系解析項目

計画研究

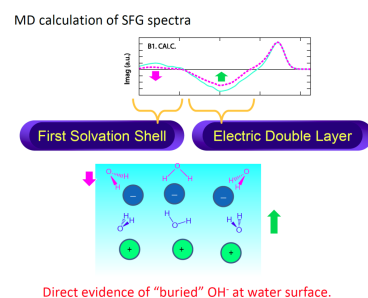
北尾は、理論と実験の共同研究の成果として、シャルコーマリートウス病への関連が指摘されているイオンチャネル TRPV4 への脂質 PI(4,5)P2 の結合がチャネルの開閉や病気に関係していることを明らかにした (*Nat. Commun.* 2014)。理論計算から、イオンチャネル TRPV4 のアンキリンリピートドメイン (ARD) と脂質膜が安定に結合し、類縁の TRPV1 の ARD と脂質 PI(4,5)P2 の相互作用が ARD ドメイン全体を柔らかく大きく移動させることを明らかにした。



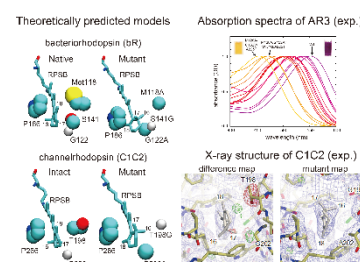
また北尾は、実験で得られていた変異体情報と分子動力学から細菌べん毛のプロトン透過装置の立体構造モデルを構築し、タンパク質内にチャネル内にあるゲートをプロトンが H_3O^+ として透過することをシミュレーションによって示した (*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2015)。この過程は従来の Grothuss 機構とは異なる注目すべき結果である。



森田は、水溶液界面の和周波分光 (SFG) の理論を国際的に先導して研究を進め、開発した汎用 SFG 計算プログラム Calnos は高い並列化と高速化を達成している。この Calnos を水溶性界面に応用し、塩基性水溶液や氷表面の構造とスペクトルを解明する成果を生みだしている。また SFG 実験との比較により A02 田原らの連携を推進している。国際的にも森田の研究は先導的であると認知され、定評の高い *Chem. Rev.* 誌 (2014) に包括的なレビューを発表した。



林重彦は、発色団の構造変化を誘起する点変異体を理論的に予測し、生体分子の柔らかさを生かした合理的機能設計を行った。予測した変異体は、A03 須藤や濡木ら（東大）との共同研究で実験的に短波長シフトを示すことが示され、発色団の構造変化が理論予測通りであること、またより短波長の光照射でマウス脳スライス中の神経細胞の活動電位を惹起することが確認された (*Nat. Commun.* 2015)。さらに A03 須藤・神取と共同した機能転換色変異体の研究 (*J. Am. Chem. Soc.* 2015) や A03 吉沢が開発した自己組織化分子の吸収スペクトル変化を理論的に解析するなどの成果 (*J. Am. Chem. Soc.* 2013) を挙げている。



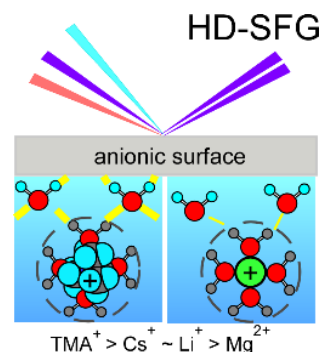
公募研究

倉重は独自の高精度理論を用いており、共同研究も積極的に推進している。A03 村橋との共同研究では多点連続 π -配位結合構造 (*Nat. Commun.* 2015) や環状不飽和炭化水素類の金属シートへの連続 π -配位結合の形成と動的挙動 (*Angew. Chem.* 2015) の研究で成果をあげ、さらに A03 楊井と共同して分子集合によるフォトン・アップコンバージョンのメカニズムを解明した (*Angew. Chem.* 2015)。

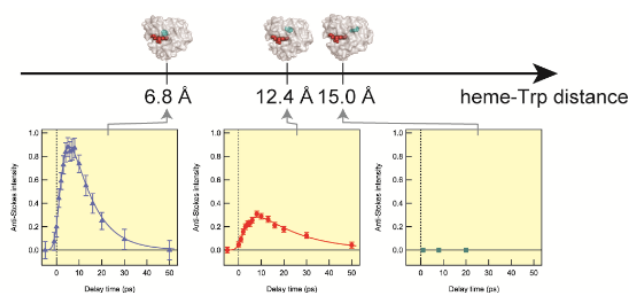
A02 柔らかな分子系計測項目

計画研究

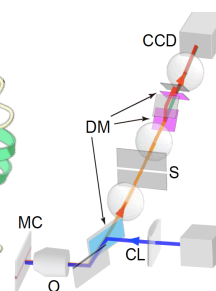
田原は独自に開発したヘテロダイン検出電子/振動和周波発生法を用いて、生化学的に重要な界面の水の研究を進めた。特に帯電した界面での対イオン効果を検討し、カチオンのホフマイスター系列と界面水の水素結合強度に相関があることを見出して、ホフマイスター塩効果の新しい機構を提唱した (*J. Am. Chem. Soc.* 2014)。また新しい単一分子計測である二次元蛍光寿命相関分光法を開発し、シトクロム *c* の複数の折り畳み中間状態とマイクロ秒で起こる相互構造変換の検出に成功した (*Nat. Commun.* 2015)。



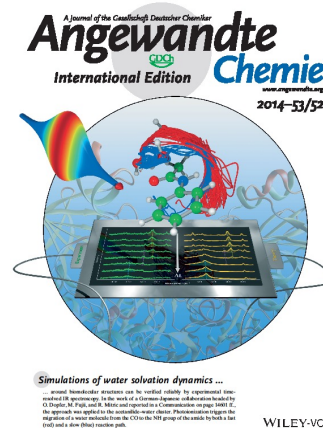
水谷はヘムタンパク質を利用して、エネルギー供与体と受容体の相対配置を制御した分子をつくり、時間分解アンチストークス分光法を用いてタンパク質内のエネルギー伝搬について調べた。これは、タンパク質内のエネルギー伝搬をアミノ酸残基の空間分解能で計測した画期的な成果である (*J. Phys. Chem. Lett.* 2014)。



高橋はタンパク質のフォールディング運動や機能運動の解明のために、蛍光分光法を用いた一分子の運動観測技術を確立した。ラインフォーカス型共焦点顕微鏡を新たに開発し、従来の時間分解能を遥かに上回る100 マイクロ秒以内での一分子蛍光の連続観察をはじめて可能にした (*J. Phys. Chem. B* 2015)。

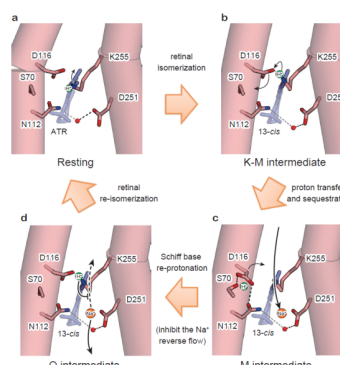


藤井はアセトアニリド-水クラスターに UV-IR ピコ秒時間分解赤外分光法を適用し構造転換を観測した。実験データと“On the fly” MD シミュレーションの結果を総合的に解析し、高速および低速の二つのチャンネルが存在することを初めて明らかにした。この結果は *Angewandte Chemie International Edition* 誌 (2014) の表紙に採用された。



公募研究

川村は *In-situ* 光照射-固体 NMR を用いて、センサーロドプシン I の正および負の走光性に関わる M および P 中間体におけるレチナールの信号の観測に成功した。センサーロドプシン I の二つの機能発現メカニズムを理解するための重要な成果である (*Angew. Chem.* 2014)。この成果は、分光学研究に関する国際情報サイト spectroscopyNOW.com (Wiley) に Journal Highlight として紹介された (2014 年 8 月 4 日)。



A03 柔らかな分子系創成項目

計画研究

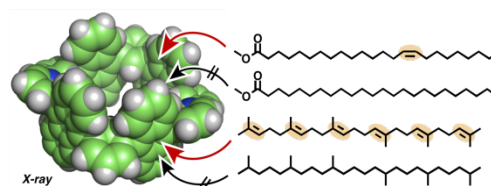
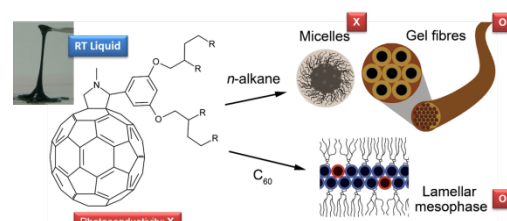
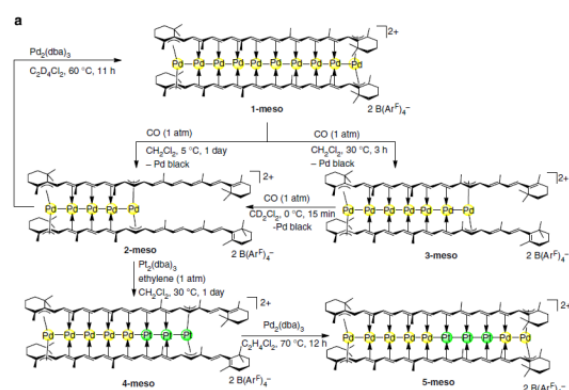
神取は領域が開始する直前にその存在を *Nat. Commun.* に報告した光駆動 Na⁺ポンプの結晶構造を決定し、輸送モデルを提唱した (*Nature* 2015)。

構造解析、機能解析、光遺伝学応用、機能創成のすべてを含み 23 名の著者で *Nature* 誌に Article として発表した本論文において、神取グループは機能解析のすべてのデータを得たのに加えて、天然に存在しない K^+ ポンプの創成にも成功している。また分担者の須藤、A01 の林と共同で H^+ ポンプを H^+ チャネルに機能転換した (*J. Am. Chem. Soc.* 2015)。神取の研究の国際的な評価は、分野をリードする 5 名の研究者とともに *Chem. Rev.* 誌に包括的なレビューを発表した事実にも裏付けられる (2014)。

村橋は、不飽和炭化水素類に複数の金属原子を集合させる技術を持つが、核数選択的な金属の導入法の開発により 2 分子の β カロテンの間に最大で 10 核金属鎖を構築できることを明らかにした (*Nat. Commun.* 2015)。また背面配位子効果を活用してパラジウムクラスターの反応制御にも成功している (*Angew. Chem.* 2015)。これらの研究においては A01 倉重の理論解析がメカニズムの解明に大きく貢献した。

中西尚は合理的設計・精密合成により多彩なサイズや次元性を持った有機 π 共役系化合物を創成しているが、液状アルキル化フラーレンを用いた新規自己組織化技法を開発して次元性を規制したナノマイクロ超分子構造を構築し、光導電性を制御した (*Nat. Chem.* 2014)。

吉沢は様々な包接化合物を生み出しているが、ナノカプセルの分子内包摂能と光遮蔽および圧縮効果を利用してラジカル開始剤の反応制御に成功するとともに (*Nat. Commun.* 2014)、アントラセン環を利用した剛直な分子チューブによる柔軟な“ひも状”生体分子の高選択的な捕捉を達成した (*Nat. Commun.* 2014)。また A01 林との共同研究によって自己組織化分子の吸収スペクトルの変化を解明した (*J. Am. Chem. Soc.* 2013)。



公募研究

片平はNMRを用いて抗HIV活性を有するタンパク質の触媒活性のメカニズムを明らかにした (*Angew. Chem.* 2014)。寺尾は炭素共役系に匹敵する高い分子内電荷移動度を達成した金属被覆型分子ワイヤの合成に成功した (*J. Am. Chem. Soc.* 2014)。大洞は異常な互変異性体構造を安定に有するポルフィリノイド化合物を創製した (*Angew. Chem.* 2014)。佐藤は巨大な外場応答を示す柔らかな分子結晶を研究する中で、分子の配向変化がマクロな機械的機能に変換される柔らかいニッケル錯体結晶を開発し (*Nat. Chem.* 2014)、またスピン量子数が世界最高値を示す籠型鉄 42 核錯体の開発に成功した (*Nat. Commun.* 2015)。楊井は分子集合によるフォトン・アップコンバージョンを発見し A01 倉重とメカニズムを解明した (*Angew. Chem.* 2015)。

5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開發表等）（5 ページ程度）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付してください。また、一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。また、別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。

(1) 主な論文一覧（◎は分野融合論文）

A01 項目

- ◎“Gate-controlled proton diffusion and protonation-induced ratchet motion in the stator of the bacterial flagellar motor”, Y. Nishihara, and *A. Kitao, *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* in press (2015). 査読有
- ◎“Atomistic design of microbial opsin-based blue-shifted optogenetics tools, H. E. Kato, M. Kamiya, S. Sugo, J. Ito, R. Taniguchi, A. Orito, K. Hirata, A. Inutsuka, A. Yamanaka, A. D. Maturana, R. Ishitani, Y. Sudo, *S. Hayashi, and *O. Nureki, *Nat. Commun.* in press (2015). 査読有
- “Theoretical study on the torsional direction of simple ethylenoids after electronic relaxation at the conical intersection in the cis-trans photoisomerization”, Y. Amatatsu, *Chem. Phys. Lett.* in press (2015). 査読有
- “Amide I vibrational properties affected by hydrogen bonding out-of-plane of the peptide group”, *H. Torii, *J. Phys. Chem. Lett.* 6, 727-733 (2015). 査読有
- “Mass spectrometric approach for characterizing the disordered tail regions of the histone H2A/H2B dimer”, K. Saikusa, A. Nagadoi, K. Hara, S. Fuchigami, H. Kurumizaka, Y. Nishimura, and *S. Akashi, *Anal. Chem.* 87, 2220-2227 (2015). 査読有
- ◎“TRPV4 channel activity is modulated by direct interaction of the ankyrin domain to PI(4,5)P₂”, †N. Takahashi, †S. Hamada-Nakahara, †Y. Itoh, †K. Takemura, A. Shimada, Y. Ueda, M. Kitamata, R. Matsuoka, K. Hanawa-Suetsugu, Y. Senju, M. X. Mori, S. Kiyonaka, D. Kohda, *A. Kitao, *Y. Mori and *S. Suetsugu (†equal contribution), *Nat. Commun.* 5, 4994(1-15) (2014). 査読有
- “Molecular dynamics analysis of NaOH aqueous solution surface and the sum frequency generation spectra: Is surface OH⁻ detected by SFG spectroscopy?”, T. Imamura, T. Ishiyama, and *A. Morita, *J. Phys. Chem. C* 118, 29017-29027 (2014). 査読有
- “Theoretical studies of structures and vibrational sum frequency generation spectra at aqueous interfaces”, T. Ishiyama, T. Imamura, and *A. Morita, *Chem. Rev.* 114, 8447-8470 (2014). 総説, 査読有
- “Theory and efficient computation of differential vibrational spectra”, S. Sakaguchi, T. Ishiyama, and *A. Morita, *J. Chem. Phys.* 140, 144109 (13 pages) (2014). 査読有
- ◎“F-subunit reinforces torque generation in V-ATPase”, J. Kishikawa, A. Seino, A. Nakanishi, N. E. Tirtom, H. Noji, *K. Yokoyama, and *K. Hayashi, *Euro. Biophys. J.* 43, 415-422 (2014). 査読有
- ◎“Analysis of the structural and functional roles of coupling helices in the ATP-binding cassette transporter MsbA through enzyme assays and molecular dynamics simulations”, T. Furuta, T. Yamaguchi, H. Kato, and *M. Sakurai, *Biochemistry* 53, 4261-4277 (2014). 査読有
- ◎“Energy landscape views for interplays among folding, binding, and allostery of calmodulin domain”, W. Li, *W. Wang, and *S. Takada, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 111, 10550-10555 (2014). 査読有
- “Exploring the reaction coordinates for f-f emission and quenching of lanthanide complexes – Thermosensitivity of terbium(III) luminescence”, *M. Hatanaka, and *K. Morokuma, *J. Chem. Theory Comput.* 10, 4184-4188 (2014). 査読有
- “Influence of surface polarity on water dynamics at the water/rutile TiO₂(110) interface”, T. Ohto, A. Mishra, S. Yoshimune, *H. Nakamura, M. Bonn, and *Y. Nagata, *J. Phys.: Condens. Matter* 26, 244102-244102 (2014). 査読有
- “Efficient implementation of the three-dimensional reference interaction site model method in the fragment molecular orbital method”, *N. Yoshida, *J. Chem. Phys.* 140, 5163-5175 (2014). 査読有
- “IDATEN and G-SITENNO: GUI assisted software for coherent X-ray diffraction imaging experiments and data analyses at SACLA”, Y. Sekiguchi, M. Yamamoto, T. Oroguchi, Y. Takayama, S. Suzuki, and *M. Nakasako, *J. Sync. Rad.* 21, 1378-1383 (2014). 査読有
- “Theoretical study of the $\pi \rightarrow \pi^*$ excited states of oligoacenes: a full π -valance DMRG-CASPT2 study”, *Y. Kurashige, and T. Yanai, *Bull. Chem. Soc. Jpn* 87, 1071-1073 (2014). 査読有

A02 項目

- “Microsecond protein dynamics observed at the single molecule level”, T. Otosu, K. Ishii and *T. Tahara, *Nat. Commun.*, in press (2015). 査読有

2. "Ultrafast excited-state dynamics of copper (I) complexes", M. Iwamura, S. Takeuchi, and *T. Tahara, *Accounts Chem. Res.* 48, 782-791 (2015). 総説, 査読有
3. "Complexity of the folding transition of the B domain of protein A revealed by high-speed tracking of single-molecule fluorescence time series", H. Oikawa, K. Kamagata, M. Arai, and *S. Takahashi, *J. Phys. Chem. B* 119, 6081-6091 (2015). 査読有
4. "Ultrafast time-resolved vibrational spectroscopies of carotenoids in photosynthesis", *H. Hashimoto, M. Sugisaki, and M. Yoshizawa, *Biochim. Biophys. Acta* 1847, 69-78 (2015). 査読有
5. ◎"High-speed angle-resolved imaging of single gold nanorod with microsecond temporal resolution and one-degree angle precision", S. Enoki, R. Iino, Y. Niitani, Y. Minagawa, M. Tomishige, and *H. Noji, *Anal. Chem.* 87, 2079-2086 (2015). 査読有
6. ◎"Long-tip high-speed atomic force microscopy for nanometer-scale imaging in live cells", *M. Shibata, T. Uchihashi, T. Ando, and *R. Yasuda, *Sci. Rep.* 5, 8724 (2015). 査読有
7. ◎"Higd1a is a positive regulator of cytochrome c oxidase", T. Hayashi, Y. Asano, Y. Shintani, H. Aoyama, H. Kioka, O. Tsukamoto, M. Hikita, K. Shinzawa-Itoh, K. Takafuji, S. Higo, H. Kato, S. Yamazaki, K. Matsuoka, A. Nakano, H. Asanuma, M. Asakura, T. Minamino, Y. Goto, T. Ogura, M. Kitakaze, I. Komuro, Y. Sakata, T. Tsukihara, S. Yoshikawa, and *S. Takashima, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 112, 1553-1558 (2015). 査読有
8. ◎"Quantum unidirectional rotation directly imaged with molecules", K. Mizuse, K. Kitano, H. Hasegawa, and *Y. Ohshima, *Sci. Adv.* in press (2015). 査読有
9. "Imaging three-dimensional surface objects with submolecular resolution by atomic force microscopy", *C. Moreno, O. Stetsovych, T. K. Shimizu, and O. Custance, *Nano Lett.* 15, 2257-2262 (2015). 査読有
10. "Observing vibrational energy flow in a protein with the spatial resolution of a single amino acid residue", N. Fujii, M. Mizuno, H. Ishikawa, and *Y. Mizutani, *J. Phys. Chem. Lett.* 5, 3269-3273 (2014). 査読有
11. "Counterion effect on interfacial water at charged interfaces and its relevance to the Hofmeister series", S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, and *T. Tahara, *J. Am. Chem. Soc.* 136, 6155-6158 (2014). 査読有
12. "Solvent migration in microhydrated aromatic aggregates: Ionization-induced site switching in the 4-aminobenzonitrile-water cluster", T. Nakamura, M. Schmies, A. Patzer, M. Miyazaki, S. Ishiuchi, M. Weiler, *O. Dopfer, and *M. Fujii, *Chem. Eur. J.* 20, 2031-2039 (2014). 査読有
13. "Single water solvation dynamics probed by infrared spectra – Theory meets experiment", M. Wohlgemuth, M. Miyazaki, M. Weiler, M. Sakai, *O. Dopfer, *M. Fujii, and *R. Mitric, *Angew. Chem. Int. Ed.* 53, 14601-14604 (2014). 査読有
14. ◎"Filming biomolecular processes by high-speed atomic force microscopy", *T. Ando, T. Uchihashi, and S. Scheuring, *Chem. Rev.* 114, 3120-3188 (2014). 総説, 査読有
15. "Chirality discriminated by heterodyne-detected vibrational sum frequency generation", M. Okuno, and *T. Ishibashi, *J. Phys. Chem. Lett.* 5, 2874-2878 (2014). 査読有
16. ◎"Color discriminating retinal configurations of sensory rhodopsin I by photo-irradiation solid state NMR spectroscopy", H. Yomoda, Y. Makino, Y. Tomonaga, T. Hidaka, *I. Kawamura, T. Okitsu, A. Wada, *Y. Sudo, and *A. Naito, *Angew. Chem. Int. Ed.* 53, 6960-6964 (2014). 査読有
17. "Two-way traffic of glycoside hydrolase family 18 processive chitinases on crystalline chitin", *K. Igarashi, *T. Uchihashi, T. Uchiyama, H. Sugimoto, M. Wada, K. Suzuki, S. Sakuda, T. Ando, T. Watanabe, and M. Samejima, *Nat. Commun.* 5, 3975 (2014). (#:共同筆頭著者) 査読有
18. "Temperature effects on prevalent structures of hydrated Fe⁺ complexes: Infrared spectroscopy and DFT calculations of Fe⁺(H₂O)_n (n=3-8)", *K. Ohashi, J. Sasaki, G. Yamamoto, K. Judai, N. Nishi, and H. Sekiya, *J. Chem. Phys.* 141, 214307(1-10) (2014). 査読有
19. ◎"Effects of proton motive force on the structure and dynamics of bovine cytochrome c oxidase in phospholipid vesicles", T. Nomura, S. Yanagisawa, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa, *T. Ogura, *Biochemistry* 53, 6382-6391 (2014). 査読有
20. "Effect of the electron density of the heme Fe atom on the Fe-histidine coordination bond in deoxy myoglobin", R. Nishimura, T. Shibata, H. Tai, I. Ishigami, S. Yanagisawa, *T. Ogura, S. Neya, A. Suzuki, and *Y. Yamamoto, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 87, 905-911 (2014). 査読有
21. "Time-resolved infrared absorption measurements", M. Tasumi and A. Sakamoto eds., *Introduction to Experimental Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Practical Methods*, Part II, Chap. 20, pp. 287 – 305. John Wiley & Sons, Inc. (2014) (分担執筆、章著)
22. "Relaxation mechanism of β-carotene from S₂ (1B_u⁺) state to S₁ (2A_g⁻) state: Femtosecond time-resolved near-IR absorption and stimulated resonance Raman studies in 900-1550 nm region", *T. Takaya, and K. Iwata, *J. Phys. Chem. A* 118, 4071-4078 (2014). 査読有
23. "Intersubunit communication via changes in hemoglobin quaternary structures revealed by time-resolved resonance Raman spectroscopy: Direct observation of the Perutz mechanism", K. Yamada, H. Ishikawa, M. Mizuno, N.

- Shibayama, and *Y. Mizutani, *J. Phys. Chem. B* 117, 12461–12468 (2013). 査読有
24. “Two-dimensional fluorescence lifetime correlation spectroscopy: 2. Application” K. Ishii, and *T. Tahara, *J. Phys. Chem. B* 117, 11423–11432 (2013). 査読有
25. “Microsecond dynamics of an unfolded protein by a line confocal tracking of single molecule fluorescence”, H. Oikawa, Y. Suzuki, M. Saito, K. Kamagata, M. Arai, and *S. Takahashi, *Sci. Rep.* 3, 2151 (6 pages) (2013). 査読有

A03 項目

1. ©“Structural basis for Na⁺ transport mechanism by a light-driven Na⁺ pump”, H. E. Kato, K. Inoue, R. Abe-Yoshizumi, Y. Kato, H. Ono, M. Konno, T. Ishizuka, M. R. Hoque, S. Hososhima, H. Kunitomo, J. Ito, S. Yoshizawa, K. Yamashita, M. Takemoto, T. Nishizawa, R. Taniguchi, K. Kogure, A. D. Maturana, Y. Iino, H. Yawo, R. Ishitani, *H. Kandori, and *O. Nureki, *Nature* in press (2015). 査読有
2. “meso-Dibenzoporphycene has a large bathochromic shift and a porphycene framework with an unusual *cis* tautomeric form”, K. Oohora, A. Ogawa, T. Fukuda, A. Onoda, J. Hasegawa, and *T. Hayashi, *Angew. Chem. Int. Ed.* in press (2015). 査読有
3. “Aggregation-induced photon upconversion (iPUC)”, P. Duan, *N. Yanai, Y. Kurashige, and *N. Kimizuka, *Angew. Chem. Int. Ed.* in press (2015). 査読有
4. ©“Converting a light-driven proton pump into a light-gated proton channel”, K. Inoue, T. Tsukamoto, K. Shimono, Y. Suzuki, S. Miyauchi, S. Hayashi, H. Kandori, and *Y. Sudo, *J. Am. Chem. Soc.* 137, 3291–3299 (2015). 査読有
5. “Multinuclear metal binding ability of a carotene”, S. Horiuchi, Y. Tachibana, M. Yamashita, K. Yamamoto, K. Masai, K. Takase, T. Matsutani, S. Kawamata, Y. Kurashige, T. Yanai, and *T. Murahashi, *Nat. Commun.* 6, 7742 (2015). 査読有
6. “Modulation of benzene or naphthalene binding to palladium cluster sites by the backside-ligand effect”, Y. Ishikawa, S. Kimura, K. Takase, K. Yamamoto, Y. Kurashige, T. Yanai, and *T. Murahashi, *Angew. Chem. Int. Ed.* 54, 2482–2486 (2015). 査読有
7. ©“Silicon-substituted xanthene dyes and their applications in bioimaging”, Y. Kushida, T. Nagano, and *K. Hanaoka, *Analyst* 140, 685–695 (2015). 査読有
8. “Synthesis and properties of benzophospholo[3,2-*b*]benzofuran derivatives”, M. Takahashi, *K. Nakano, and *K. Nozaki, *J. Org. Chem.* 80, 3790–3797 (2015). 査読有
9. “Boosting of activity enhancement of K⁺-responsive quadruplex hammerhead ribozyme”, Y. Yamaoki, T. Mashima, T. Nagata, and *M. Katahira, *Chem. Commun.* 51, 5898–5901 (2015). 査読有
10. “A Ferromagnetically Coupled Fe₄₂ Cyanide-Bridged Nanocage”, S. Kang, H. Zheng, *T. Liu, K. Hamachi, S. Kanegawa, K. Sugimoto, Y. Shiota, S. Hayami, M. Mito, T. Nakamura, M. Nakano, M. L. Baker, H. Nojiri, K. Yoshizawa, C. Duan, and *O. Sato, *Nat. Commun.* 6, 5955 (2015). 査読有
11. “Microbial and animal rhodopsins: Structures, functions, and molecular mechanisms” *O. P. Ernst, D. T. Lodowski, M. Elstner, P. Hegemann, L. S. Brown, and H. Kandori, *Chem. Rev.* 114, 126–163 (2014). 総説, 査読有
12. “A polyaromatic molecular tube that binds long hydrocarbons with high selectivity”, K. Yazaki, Y. Sei, M. Akita, and *M. Yoshizawa, *Nat. Commun.* 5, 5179 (2014). 査読有
13. “Safe storage of radical initiators within a polyaromatic nanocapsule”, M. Yamashina, Y. Sei, M. Akita, and *M. Yoshizawa, *Nat. Commun.* 5, 4662 (2014). 査読有
14. “Directed assembly of optoelectronically active alkyl- π -conjugated molecules by adding *n*-alkanes or π -conjugated species”, *M. J. Hollamby, M. Karmy, P. H. H. Bomans, N. A. J. M. Sommerdijk, A. Saeki, S. Seki, H. Minamikawa, I. Grillo, B. R. Pauw, P. Brown, J. Eastoe, H. Möhwald, and *T. Nakanishi, *Nat. Chem.* 6, 690–696 (2014). 査読有
15. “Robust trans-amide helical structure of oligomers of bicyclic mimics of beta-proline: Impact of positional switching of bridgehead substituent on amide *cis-trans* equilibrium”, S. Wang, *Y. Otani, X. Liu, M. Kawahata, K. Yamaguchi, and *T. Ohwada, *J. Org. Chem.* 79, 5287–5300 (2014). 査読有
16. ©“Design strategy for small molecule-based targeted MRI contrast agents: Application for detection of atherosclerotic plaques”, S. Iwaki, K. Hokamura, M. Ogawa, Y. Takehara, Y. Muramatsu, T. Yamane, K. Hirabayashi, Y. Morimoto, K. Hagiwara, K. Nakahara, T. Mineno, T. Terai, T. Komatsu, T. Ueno, K. Tamura, Y. Adachi, Y. Hirata, M. Arita, H. Arai, K. Umemura, T. Nagano, and *K. Hanaoka, *Org. Biomol. Chem.* 12, 8611–8618 (2014). 査読有
17. “Quantitative analysis of the location- and sequence-dependent deamination by APOBEC3G using real-time NMR”, A. Furukawa, K. Sugase, R. Morishita, T. Nagata, T. Kodaki, A. Takaori, A. Ryo, and *M. Katahira, *Angew. Chem. Int. Ed.* 53, 2349–2352 (2014). 査読有
18. ©“Enhancement of phosphorescence and unimolecular behavior in the solid state by perfect insulation of platinum–acetylide polymers”, H. Masai, *J. Terao, S. Makuta, *Y. Tachibana, T. Fujihara, and Y. Tsuji, *J. Am. Chem. Soc.* 136, 14714–14717 (2014). 査読有
19. ©“Synthesis of one-dimensional metal-containing insulated molecular wire with versatile properties directed toward molecular electronics materials”, H. Masai, *J. Terao, S. Seki, S. Nakashima, M. Kiguchi, K. Okoshi, T. Fujihara, and

- Y. Tsuji, *J. Am. Chem. Soc.* 136, 1742-1745 (2014). 査読有
20. “Colorimetric solvent indicators based on nafion membrane incorporating nickel(II)-chelate complexes”, H. Hosokawa, Y. Funasako, and *T. Mochida, *Chem. Eur. J.* 20, 15014–15020 (2014). 査読有
21. “Polymerization of hydroxy-containing diazoacetates: Synthesis of hydroxy-containing “Poly(substituted methylene)s” by palladium-mediated polymerization and poly(ester–ether)s by polycondensation through O–H insertion reaction”, H. Shimomoto, E. Itoh, T. Itoh, *E. Ihara, N. Hoshikawa, and N. Hasegawa, *Macromolecules*, 47, 4169-4177 (2014). 査読有
22. “Molecular motor-driven abrupt anisotropic shape change in a single crystal of a Ni complex”, Z.-S. Yao, M. Mito, T. Kamachi, Y. Shiota, K. Yoshizawa, N. Azuma, Y. Miyazaki, K. Takahashi, K. Zhang, T. Nakanishi, S. Kang, S. Kanegawa, and *O. Sato, *Nat. Chem.* 6, 1079-1083 (2014). 査読有
23. “Photoirradiation wavelength dependence of cycloreversion quantum yields of diarylethenes”, T. Sumi, Y. Takagi, A. Yagi, M. Morimoto, and *M. Irie, *Chem. Commun.* 50, 3928-3930 (2014). 査読有
24. “Disilanyl double-pillared bisternaphthyl (^{Si}DPBT): Synthesis and interfused packing structures with herringbone and π -stack motifs”, *W. Nakanishi, N. Matsuyama, D. Hara, A. Saeki, S. Hitosugi, *S. Seki, and *H. Isobe, *Chem. Asian J.* 9, 1782-1785 (2014). 査読有
25. “Facile catch and release of fullerenes using a photoresponsive molecular tube”, N. Kishi, M. Akita, M. Kamiya, S. Hayashi, H.-F. Hsu, and *M. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.* 135, 12976-12979 (2013). 査読有

(2) ホームページ

URL : <http://www.yawaraka.org/>

更新 47 回 (2015 年 5 月 20 日最終更新)

(3) 主催シンポジウム等

公開シンポジウム

<第1回>平成 25 年 10 月 5 日

場所：キャンパスイノベーションセンター東京・国際会議室（東京工業大学田町キャンパス内）（東京都港区）
 プログラム：領域代表者からの概要説明、研究項目班長 3 名からの概要説明および計画研究代表者 3 名の講演
 参加者：152 名

<第2回>平成 26 年 11 月 28-29 日

場所：大阪大学会館（大阪府豊中市）
 プログラム：研究代表者 21 名の講演、全研究代表者 44 名および研究分担者等によるポスター発表 94 件
 参加者：121 名

ワークショップ

	実施日	場所	テーマ	参加者数 (人)
第 1 回	H26.3.10-11	長野県諏訪市	What is soft molecular system?	14
第 2 回	H26.3.26	愛知県名古屋市	若手研究者の考える柔らかな分子系	36
第 3 回	H26.6.28	神奈川県横浜市	Over the Barriers of Transition Paths: Dynamical Processes in Proteins and Complex Molecular Systems	38
第 4 回	H26.8.2-3	茨城県つくば市	和周波分光	55
第 5 回	H26.9.20	広島県広島市	柔よく光（こう）を制す（柔らかな分子系の光機能）	34
第 6 回	H26.9.25	北海道札幌市	Regulating structure formation and function of biomolecular systems with softness	300
第 7 回	H26.12.12-13	愛知県岡崎市	分子の柔らかさを駆使した動的高分子・超分子・錯体の創成と機能	25
第 8 回	H27.1.24-25	岡山県瀬戸内市	やわらか光受容分子の理解と利用に迫るブレインストリーミング研究会	21
第 9 回	H27.3.16-17	宮城県仙台市	柔らかな系を扱う自由エネルギー計算手法	30
第 10 回	H27.5.1-2	静岡県御殿場市	計画班ワークショップ	11

アウトリーチ

実施日	場所	対象	内容	参加者数 (人)
H26.4.19	理化学研究所 (埼玉県和光市) * キャンパス一般公開にて	一般	「タンパク質に触れてみよう」 Haptic デバイスを使ったデモンストレーション。ディスプレイに表示したタンパク質に触れ、タンパク質の構造、柔らかさ、堅さなどを体感してもらった。 (領域ニュースレターNo.8)	100
H26.9.28	富山大学 (富山県富山市) * 富山大学工学部「夢大学 in 工学部 2014」にて	小中学生	「分子にさわろう! コンピュータを使った分子の世界への探索」 1 回 1 時間で 10 組、1 日 4 回の体験型授業。比較的簡単な操作で実行できる分子シミュレーションプログラムを作成し「分子シミュレーション」を体験してもらった。Haptic デバイスを使って、ヘモグロビン、アクチン、ウイルスといった分子を「さわる」あるいは「ひっぱる」といった体験を行った。 (領域ニュースレターNo.14)	80
H26.11.29	大阪大学 (大阪府豊中市) * 第 2 回公開シンポジウム終了後	高校生、 教員、 保護者	高校生のためのサイエンス体験「柔らかな分子ってどんなもの?」 「コンピュータでタンパク質の柔らかさに触れよう」、「新種の液体分子をデザインする」について、説明および体験コーナーを実施。 「新種の液体分子をデザインする」に関する体験コーナーでは、普通は固体として存在する分子を液体に変化させる方法に関して分子のモデルを使って理解してもらった。「コンピュータでタンパク質の柔らかさに触れよう」のコーナーでは、3D プリンタで印刷したタンパク質による体験と力覚装置を使った体験を行った。 (領域ニュースレターNo.16)	20
H26.12.13	スリーエム 仙台市科学館 (宮城県仙台市)	小学生および保護者	「タンパク質温度計を作ろう!」 シトクロム c のフォールディングを利用したタンパク質温度計の作成を体験。さらに、実験の途中で、実験テーブルごとに「触覚デバイス」を用いてシトクロム c やチャンネルタンパク質を見てさわる体験を実施した。 (領域ニュースレターNo.16)	70
H27.3.8	東京工業大学 蔵前会館 (東京都目黒区)	一般	サイエンスカフェ「もっと身近にサイエンス! 超分子化学: ナノサイズのカプセルを作る」 超分子化学の手法で作成に成功した分子カプセルについて、その設計から合成と構造、性質までを紹介。また、そのカプセル作り体験も実施した。 (領域ニュースレターNo.19)	30
H27.4.18	理化学研究所 (埼玉県和光市) * キャンパス一般公開にて	一般	「タンパク質に触れてみよう」 Haptic デバイスを使ったデモンストレーション。ディスプレイに表示したタンパク質に触れ、タンパク質の構造、柔らかさ、堅さなどを体感してもらった。 (領域ニュースレターNo.20)	100


新聞、テレビ等

掲載日	氏名	項目	メディア名	見出し、内容等
H26.4.25	田原 太平	A02 計画	日刊工業新聞	ホフマイスター系列の新メカニズム、理研が提案
H26.6.10	飯野 亮太	A02 公募	マイナビニュース	研究成果が「東大、有機色素分子 1 個の互変異性化の速度を記録 - "分子メモリ"の実現に道」として掲載
H26.6.17	内橋 貴之	A02 公募	北国新聞	キチナーゼの双方向運動の研究結果が掲載
H26.6.24	中西 尚志	A03 計画	日刊工業新聞	自己組織化の新技法に関する研究成果が掲載
H26.7.10	飯野 亮太	A02 公募	日刊工業新聞	研究成果が「1 分子歯車 性能評価 回転の様子も観察 東大」として掲載
H26.8.4	川村 出	A02 公募	spectroscopyNOW.com (Wiley)	研究論文 (H. Yomoda et al. (2014) <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>)が Journal Highlight として紹介
H26.8.26	吉沢 道人	A03 計画	日経産業新聞	化学物質 光・熱から保護 東工大 直径 1.5 ナノカプセル開発
H26.9.16	吉沢 道人	A03 計画	Nature Commun. 誌 ケミストリー・セクションズ	多環芳香族ナノカプセルの内包によるラジカル開始剤の安全保管法
H26.9.17	中野 幸司	A03 公募	化学工業日報	新しい低温熱分解性ポリマーに関する研究成果の掲載
H26.10.22	吉沢 道人	A03 計画	化学工業日報	生体内のひも状分子 分子チューブで識別 センシング技術開発へ 東工大
H26.11	花岡 健二郎	A03 公募	JST news (国立研究開発法人 科学技術振興機構)	「さきがける科学人」にて紹介
H26.11.7	清水 智子	A02 公募	日経産業新聞	「軽量・安価な有機メモリーに道 銅基板上に均一

				な膜」有機メモリとしての利用が期待されるフォトクロミック分子の単分子膜の形成
H26.11.21	清水 智子	A02 公募	科学新聞	「分子と陽イオンの相互作用利用 光スイッチ分子の均一膜形成」上と同じテーマ
H27.1.6	佐藤 治	A03 公募	日刊工業新聞・毎日新聞・化学工業日報・共同通信	鉄 42 核高スピン錯体の開発に関する研究成果 (Nature Commun. 6, 5955, 2015) が掲載
H27.2.10	村橋 哲郎	A03 計画	化学工業日報	パラジウムクラスターによるベンゼンのバインド挙動に関する領域内共同研究 (A03 村橋・A01 倉重) の成果が掲載
H27.2.15	須藤 雄気	A03 計画	読売新聞、化学工業日報など	研究成果が各種メディアに掲載
H27.3.5	中西 尚志	A03 計画	Chem-Station 日本人化学者インタビュー	アルキル- π エンジニアリングによる分子材料創成
H27.3.6	内橋 貴之	A02 公募	科学新聞	電気化学高速 AFM の開発に関する研究成果が掲載
H27.4.7	神取 秀樹	A03 計画	日経テレコン 21	Nature 誌に掲載される光駆動ナトリウムポンプの研究成果が掲載
H27.4.8	神取 秀樹	A03 計画	日経産業新聞	Nature 誌に掲載される光駆動ナトリウムポンプの研究成果が掲載
H27.4.10	清水 智子	A02 公募	Science 348, page 198, Editor's Choice	"SURFACE IMAGING Submolecular resolution in 3D" by Phil Szuromi (他誌で掲載された最近の論文紹介欄)
H27.4.15	神取 秀樹	A03 計画	日経バイオテック	Nature 誌に掲載される光駆動ナトリウムポンプの研究成果が掲載
H27.4.17	神取 秀樹	A03 計画	科学新聞	Nature 誌に掲載される光駆動ナトリウムポンプの研究成果が掲載

ニュースレター

領域外への情報発信のため、平成 25 年 9 月より毎月ニュースレターを発行している。現在 (平成 27 年 5 月号) までに 21 回発行し、その総ページ数は 140 ページに達している。スピーディーな情報発信を旨としており、印刷体ではなく電子版で毎月の発行を行っている。内容は、主に、領域行事の報告、業績紹介、受賞の報告、新聞掲載、班員の領域に関連する活動報告、若手研究者の海外派遣報告などである。業績紹介では、各研究グループから出た学術論文の内容を日本語で 1 ページに簡潔に紹介している。これは、領域外に研究のアクティビティを示すのに大変役立っており、この記事を読みかけに元論文をよむ読者も多いと思われる。また、領域外だけでなく、領域内でもお互いの研究をより深く理解することに役立っており、共同研究にも繋がっている。7(1)で述べる若手研究者の海外派遣制度は本領域の特色の一つであるが、支援を受けた者はニュースレターに報告記事を寄稿する。以上のように、ニュースレターの発行によって、本領域のアクティビティと特色をきわめて有効に情報発信している。


新学術領域研究「素かな分子系」ニュースレター No. 20
平成 27 年 4 月

業績紹介：分子動力学シミュレーションによる空気/水界面での二重元和周波数発生スペクトルの理論解

石山 達也 (岡山大学・A01 計研研究員) / 山本 健太 (東北大学・A01 計研研究員) / 山本 明也 (東北大学・A01 計研研究員) / 田原 太平 (理研・A02 計研研究員)

論文題目: "Molecular Dynamics Study of Two-Dimensional Sum Frequency Generation Spectra at 'Vapour/Water Interface'"

著者: T. Ishiyama, A. Mitsu, and T. Takano
 掲載誌: J. Chem. Phys. 142, 214701 (2015).

本誌は分子系が気相から液相の界面に存在する非均質な媒質である。界面水分子は、分子動力学シミュレーションの結果に不均質な構造に存在しており、バランは異なる性質を示す。ここでは、実験では観測された二重元和周波数発生(SFG)スペクトルを理論的に計算するために、シミュレーションを用いて、本界面上の水素結合構造、配向構造などを議論されてきた。我々のグループでは、MDシミュレーションによりSFGスペクトルを理論計算することにより、実験結果との比較検証を行い、理論計算の信頼性を明らかにした。

通常 SFG スペクトルとは、 ω_1 と ω_2 を変化する水の OH 振動に由来する非共振増強された二重元和スペクトルを意味し、これまで空気/水界面においては 3700cm^{-1} に OH を空変換させた Free OH バンド 3400cm^{-1} あたりには OH を空変換させた Bound OH のみが観測されてきた。今回、空気/水界面での SFG を時間軸方向に分解する時間分解 SFG スペクトルの研究も進むようになってきた。時間分解の方法では、垂直偏光による OH 振動を駆動し、 ω_1 が ω_2 により励起 ($\omega_1 = \omega_2$) させ、ある $\omega_1 = \omega_2$ の励起状態 (ポンプ) がある $\omega_1 = \omega_2 = 2\omega$ の励起状態 (プローブ) を照射する。

図 1 に、2013 年に始めて実験で観測された空気/水界面での時間分解 SFG スペクトル (2D-HS-VSFG) の例を示す。図 1 (a) は $\omega_1 = \omega_2 = 3700\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合、(b) は $\omega_1 = \omega_2 = 3400\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合を示す。図 1 (c) は $\omega_1 = \omega_2 = 3700\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合、(d) は $\omega_1 = \omega_2 = 3400\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合を示す。

図 2 に、2013 年に始めて実験で観測された空気/水界面での時間分解 SFG スペクトル (2D-HS-VSFG) の例を示す。図 2 (a) は $\omega_1 = \omega_2 = 3700\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合、(b) は $\omega_1 = \omega_2 = 3400\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合を示す。図 2 (c) は $\omega_1 = \omega_2 = 3700\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合、(d) は $\omega_1 = \omega_2 = 3400\text{cm}^{-1}$ の励起状態 (ポンプ) の場合を示す。

引用文献
 [1] P. C. Singh, S. Nishiyama, S. Yamaguchi, and T. Takano, J. Chem. Phys. 139, 104701 (2013).
 [2] Y. Ni, S. M. Greenham, and J. L. Skinner, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 109, 1992 (2012).

108

Facebook <https://www.facebook.com/soft.molecular.systems> 更新回数 56 回

Twitter <https://twitter.com/softmolsys> 更新回数 56 回

6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2ページ程度）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、研究組織間の連携状況について組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

柔らかな分子系の機能の科学という新しい学術研究の潮流を創るためには、理論、計測、創成の各面からの総合的アプローチが不可欠であり、3つの研究項目の連携・融合の必要性は自明であった。これまでは分野間の垣根が高く、なかなか進まなかった連携であるが、この「**柔らかな分子系**」を**一挙に連携を加速する起爆剤とすることが重要**である。計画研究においては、理論、計測、創成に関わる先端的研究者を連携関係をもって配置できたが、複雑分子系の理解と制御の研究を包括的に推進するには、さらに多様な研究者の参加が必要であった。

そこで計画研究ではカバーしきれない分野やトピックスからの自由な発想に基づく公募研究提案を加えることで、複雑分子系の科学である「柔らかな分子系の科学」を新しい研究領域として確立させることを目指した。領域内で計画研究と公募研究の研究者が有機的繋がりをもって連携し、共同研究を積極的に推進することによって、本新学術領域研究が構築する新たな分野の裾野が飛躍的に広がり、複雑系の解析、理解、創成に一段と拍車がかかることが期待できる。公募研究については特に、若手研究者による斬新なアイデアに基づく研究提案、既存分野の枠を乗り越えて融合研究を生み出そうとする研究提案を募集した。

その結果、平成25年度の計画研究10グループに平成26年度には公募研究34グループが加わり、現在、44グループの体制で研究を推進している。

【A01 理論】計画研究3グループ、公募研究11グループ

【A02 計測】計画研究4グループ、公募研究11グループ

【A03 創成】計画研究3グループ、公募研究12グループ

公募班員まで含めた先端的研究者の連携関係を加速させるために、本領域では年1回開催するシンポジウムに加え、全体合宿会議での徹底した議論、個別テーマに対するワークショップの開催と集中討論を行っている。これによって研究者の間に相互信頼と他分野に対する理解を生みだし、それに基づいた全国的ネットワークの形成を試みている。共同研究の推進は総括班によって支えられており、実際に当初計画を超えた連携に対して平成26年度は総額180万円の支援を行った。

平成27年4月現在、2グループ間の共同研究は計画中也含め125件である。これに加えて3グループ間にまたがる共同研究が7件あり、領域が開始してから2年、公募班員が加わってから1年で期待以上の連携が進んでいることがわかる。実際に2グループ間の125件の共同研究のうち、計画班員同士によるものは40件、計画班員と公募班員（班友を含む）との間の共同研究が40件、公募班員（班友を含む）同士による共同研究は45件であり、公募班員の積極性が領域によい影響を与え、きわめてバランスのよい連携体制が構築できていることがわかる。

【項目別の共同研究状況】

項目内 A01とA01: 6件、A02とA02: 10件、A03とA03: 13件

項目間 A01とA02: 26件、A01とA03: 27件、A02とA03: 43件

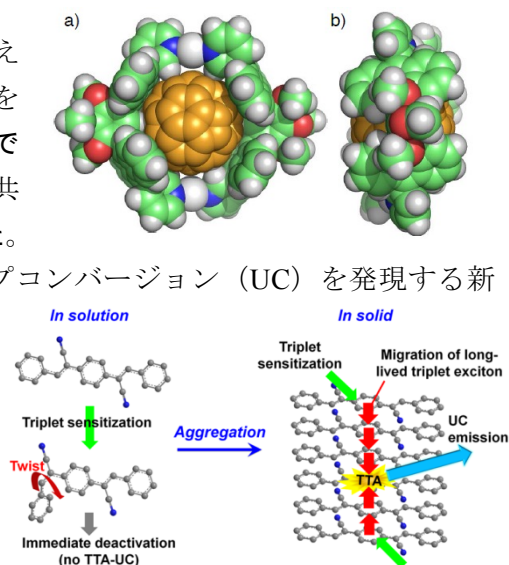
また上記の通り、理論（A01）、計測（A02）、創成（A03）という異なる分野の間の共同研究は予想以上に活発に進んでいる。現在はA03の独自性のある試料に対してA02の独自性のある計測法で諸性質を調べているという事例が多いが、これにA01の理論解析が加わることが期待される。

次にハイライトとなる共同研究を、すでに論文発表済のもの、現在進行中のものの順で紹介する。

【論文発表した共同研究例】

A03 吉沢・A01 林：配位結合性チューブがフラレンを捉まえるプロセスを吉沢は実験的に見出し、吸収スペクトルの変化を林の計算により解明した (*J. Am. Chem. Soc.* 2013)。本領域で初めて出会った計画班員 2 名による理論と創成の理想的な共同研究が実現し、開始から 1 年以内で *JACS* 誌に論文発表した。

A03 楊井・A01 倉重：分子が集合することでフォトン・アップコンバージョン (UC) を発現する新しい現象を楊井が発見した。三重項増感剤と発光分子の混合溶液をキャストして得られる固体でのみ明確な UC 発光が観測され、このメカニズムを倉重の計算により解明した (*Angew. Chem.* 2015)。本領域で初めて出会った公募班員 2 名による理論と創成の理想的な共同研究が実現し、開始から 1 年以内で *Angew. Chem.* に論文発表した。



この他にも発表済の共同研究として A01 森田・A02 田原による水界面の和周波分光 (*J. Chem. Phys.* 2015)、A01 林重・A03 須藤による短波長吸収ロドプシンのデザイン (*Nature Commun.* 2015)、A01 林重・A03 須藤・A03 神取によるロドプシンの機能転換 (*J. Am. Chem. Soc.* 2015)、A01 林重・A02 飯野による回転モーターのメカニズム研究 (*Biochemistry* 2015)、A01 櫻井、A01 吉田によるトランスポーター研究 (*Chem. Phys. Lett.* 2014) A02 水谷・A03 廣田 (班友) によるミオグロビンオリゴマーのダイナミクス (*J. Biol. Inorg. Chem.* 2015)、A02 高橋・A03 新井 (班友) による BdpA 折畳みの一分子分光 (*Sci. Rep.* 2013; *J. Phys. Chem. B* 2015)、A02 飯野・A02 内橋によるセルラーゼの高速原子間力顕微鏡観察 (*J. Biol. Chem.* 2014)、A02 川村・A03 須藤によるロドプシンの NMR 研究 (*Angew. Chem.* 2014) などを挙げるができる。

【進行中の共同研究】

上記のようにすでに論文発表を行った共同研究の数は現時点で限られているが、125 件のうち 85 件が公募班員に関わる共同研究であるため、むしろ当然かと思われる。今後、連携によるどのような研究の進展があるか、大いに期待される。特に強調したいのは、2 グループによる文字通りの共同研究だけでなく、3 グループにわたる研究の展開 (線から面への拡がり) が複数の分子系で試みられていることである。その例として、タンパク質の折畳み研究 (A01 北尾・A02 田原・A02 高橋)、気相中におけるペプチド分子のダイナミクス研究 (A01 北尾・A01 八木・A02 藤井)、非平衡気液界面における分子の自己組織化研究 (A01 森田・A02 田原・A03 中西尚志)、ペプチド鎖のラマン信号の解析 (A01 鳥居・A02 石橋・A03 尾谷)、ロドプシン内部のイオン輸送経路の解析 (A01 林重・A01 吉田・A03 神取) などが挙げられる。共同研究が 2 グループから 3 グループへと拡がりを見せることは、理論・計測・創成が三つ巴となった本領域の自然な姿であり、今後に大きな期待がある。

さらなる研究の拡がりに関して、A03 中西尚志が調製した液体ピレン分子の光励起現象について A02 高屋による高速分光と A01 倉重による理論解析が行われているが、最近、A02 川村の NMR 分光が加わり、4 グループにまたがる共同研究に発展しようとしている。同様の研究の拡がり、多核金属錯体のダイナミクス研究 (A01 倉重・A02 田原・A03 神取・A03 村橋) や光駆動ナトリウムポンプのダイナミクス研究 (A01 林重・A01 吉田・A02 水谷・A02 田原・A03 神取) などにも見られており、このような軸になるいくつかの分子系に対して領域の複数グループが集中的に研究を行う体制がごく自然に形成されていることは特筆できるであろう。

7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1 ページ程度）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

本領域では研究の推進と同時に若手研究者の育成にも力を入れている。具体的に総括班活動として以下の取り組みを行っている。

（1）若手研究者の海外派遣

我が国の将来の科学・技術のためには国際的な感覚をもった次世代を担える若手研究者を育成することが極めて重要である。そこで、総括班経費を用いて若手研究者（大学院生、博士研究員、助教）の海外渡航支援を行った。班員の研究室に所属する若手研究者を対象とし、①国際研究集会への参加、②海外研究者との共同研究・議論のための渡航、を支援した。ただし国際研究集会への参加のための渡航でも、単に参加するだけでなく、学会で積極的に質問し海外の研究者と活発な討論を行うこと、また学会の前後に一人で海外の大学・研究所等を訪問して見聞を広めることを強く推奨した。渡航の報告は領域ニュースレターに掲載することとした。

派遣者は全班員にアナウンスして応募者を募り、その中から総括班実行グループが議論して対象者を決定した。選考にあたっては①年齢の若いものと②単なる学会参加でないもの（研究室見学や共同研究についての討論の為の訪問も行うもの）を優先して採用した。

派遣実績は以下の通り：

平成 25 年度：11 名（大学院生 7、博士研究員 4）。派遣先：アメリカ合衆国、ドイツ、イギリス、オーストラリア、シンガポール、台湾。

平成 26 年度：11 名（大学院生 8、博士研究員 3）。派遣先：アメリカ合衆国、アルゼンチン、ドイツ、フランス、オランダ、ベルギー、ニュージーランド。

平成 27 年度（派遣決定済）：10 名（大学院生 5、博士研究員 4、助教 1）アメリカ合衆国、フランス、チェコ、スペイン、インド、韓国。

（2）若手ワークショップの開催

本領域では全班員が参加する年 2 回の全体行事の他に、先鋭的な討論を行うために 10～30 人規模のワークショップの開催を行っている（平成 25 年度 2 件、平成 26 年度 7 件開催）。このうち、毎年度 1 回を若手研究者が発案、運営する若手ワークショップとし、若手研究者が講演、議論によって互いに切磋琢磨する場とした。これまで 2 回開催した若手ワークショップの概要は以下の通り：

平成 25 年度若手ワークショップ 「若手研究者の考える柔らかな分子系」

オーガナイザー：中西（物材機構独立研究者、A03 計画班員）、吉沢（東工大准教授、A03 計画班分担者）、岩田（名工大助教、A03 班計画班連携研究者）、井上（名工大助教、A03 班計画班連携研究者）、2014 年 3 月 26 日、愛知県名古屋市。

平成 26 年度若手ワークショップ 「柔よく光を制す（柔らかな分子系の光機能）」

オーガナイザー：倉重（分子研助教、A01 公募班員）、水野（阪大助教、A02 班分担者）、揚井（九大助教、A03 公募班員）：2014 年 9 月 20 日、広島県広島市。

（3）合宿会議での徹底した討論

全体行事である公開シンポジウムと合同班会議に積極的に大学院生など若手研究者に参加、積極的にポスター発表を行うように促した。特にカンヅメになって泊まりがけで行う合同班会議においては夜にポスター発表時間を設定し、深夜までシニア・中堅の研究者と十分な議論を行えるようにした。

8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1 ページ程度）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

◎北尾彰朗（A01）は、汎用分子シミュレーション用計算機システムを購入して研究室内で計算を効率的に実行し、比較的短時間・多回数のシミュレーションや量子化学計算に大いに活用している。これらは、A02 田原、A02 高橋、A03 神取との共同研究に大いに役立っている。

◎北尾彰朗（A01）は、タンパク質などの複雑な形状の分子系を3Dモデルで実際に直接触って検討するため3Dプリンタを導入し、立体構造の解析に活用している。また3Dプリンタで印刷したタンパク質3Dモデルは、アウトリーチ活動で参加者に分子の形を体感してもらうことに用い、研究成果を社会に発信する際にも活用している（総括班活動）。

◎北尾彰朗（A01）と◎田原太平（A02）は、分子系をコンピュータ上で体感しながら操作できる力覚デバイスをそれぞれ導入し、分子の解析に用いている。またこの装置はコンピュータ上で分子を操作する作業をアウトリーチ活動の参加者に体験してもらうことで、社会へと研究成果を発信するために大いに役立っている（総括班活動）。

◎森田明弘（A01）は、汎用プログラム開発と検証のために初年度に計算サーバを導入し、その後追加で計算結果の解析のための環境を整備した。これらの計算機は、本領域の理論開発や結果の解析のための不可欠な設備として稼働し、A02 田原との共同研究にも活用されている。また本領域の研究費で雇用した博士研究員は、研究提案のなかでの振動差スペクトルの理論開発を中心に進めている。

◎林重彦（A01）は、分子動力学計算及びQM/MM RWFE-SCF 計算を行うために、分子シミュレーション用計算機を購入した。膜タンパク質である微生物型ロドプシンのMDシミュレーション及び量子化学計算を含むQM/MM RWFE-SCF 計算のために、Xeon CPU クラスタ型計算機を購入し、それをを用いて多くの成果が上がっている。また水溶性タンパク質及び自己組織化包接分子複合体のMDシミュレーションのために、GPUを搭載した計算機を購入した。非常に高速なサンプリングが行えるため、変異体の設計や包接分子複合体のモデリングに大いに役に立っている。

◎田原太平（A02）はある遅延時間のフェムト秒時間分解蛍光スペクトルを一度に測定できる蛍光アップコンバージョン装置を製作するために、この検出器として使用する高感度液体窒素冷却型CCD検出器を購入した。本装置はA03 吉沢の合成した新しい超分子ミセルに包摂された分子の光応答の研究など共同研究にも大いに役立っている。

◎水谷泰久（A02）は、高感度の時間分解共鳴ラマンスペクトル計測を行うために、小型固体レーザー、iHR320分光器、液体窒素冷却型CCD検出器システムを購入した。微量のタンパク質試料についても高感度のスペクトル測定が可能であり、タンパク質のダイナミクス観測に活躍している。本装置は、A03 神取、A01 北尾との共同研究にも大いに役立っている。

◎高橋聡（A02）は、タンパク質試料の精製を行うためのHPLC装置や大腸菌の培養実験に必要なオートクレーブなどを購入した。これにより、田原グループに提供するタンパク質試料の精製が大きく加速した。さらに、時間相関シングルフォトンカウンティングモジュールなどを導入し、一分子時系列データを高速取得するための基盤を整えた。これにより、北尾グループで理論計算を行うための基となる時系列データの時間分解能の向上が図られた。

◎藤井正明（A02）はOPOレーザー励起用高ビーム品質YAGレーザーを購入してOPOレーザーと組み合わせ、赤外波長可変レーザー光の発生に用いている。本装置は気相における柔らかなペプチドとその錯体の赤外スペクトル測定に有用に稼働しており、A01 北尾、A01 八木（班友）との共同研究に大いに役立っている。

◎神取秀樹（A03）は遺伝子改変したタンパク質精製のための機器（クロマトグラフィーシステム、リアルタイムPCR、電動フレンチプレス、クロマトチェンバー等）を購入し、その結果、効率よい試料調製が可能になった。これによりA01の北尾、林、吉田、A02 水谷、田原、内橋、A03 須藤、片平との共同研究に大いに役立っている。

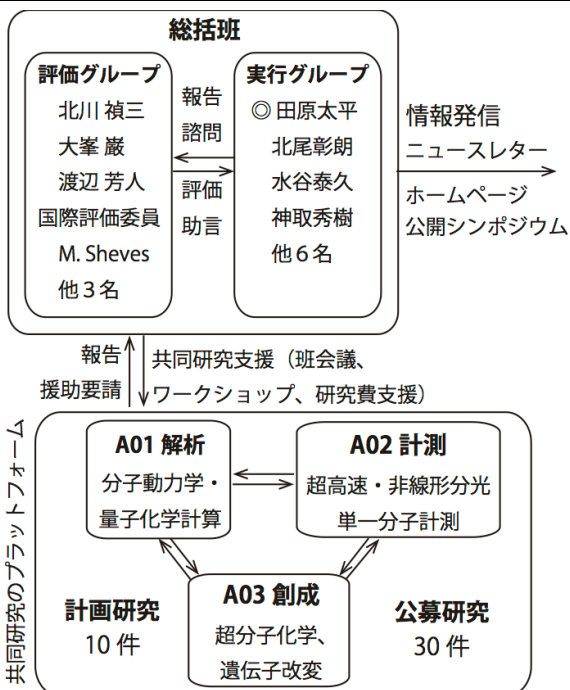
◎村橋哲郎（A03）は有機多核金属複合体の動的性質を解明するため、極低温反応機を購入し、温度依存性を解明する研究に対して有用に稼働し、A01 倉重との共同研究にも有効利用されている。

◎中西尚志（A03）はバルク分子相の相転移挙動の微弱信号まで検出可能な高感度示差走査熱量計を購入した。常温ピレン液体の分子運動性の理解が可能となり、A02 高屋、A02 川村らとの状態緩和過程の理解に関する共同研究に大いに役立っている。また、購入した分取用GPCカラムにより、合成分子の最終精製の高効率化が達成され、種々の共同研究のための試料提供の態勢が整った。

9. 総括班評価者による評価（2 ページ程度）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

総括班は、研究方針の策定を行い、研究項目間の調整・サポート・総括を行う。総括班は、領域代表者を含む計画研究代表者 10 名（代表者 1、分担者 4、協力者 5）からなる実行グループと国内の研究協力者 3 名と国際評価委員 4 名からなる評価グループから構成する（右図）。評価グループは、領域全般の研究に関して世界的な動向をも含めた評価や提言を行う。実行グループは、これを受けて全体の研究方針を策定し、研究を推進するための支援活動を行う。以下、国内評価委員と国際評価委員の本領域に対する評価を述べる。



国内評価委員

北川 禎三（兵庫県立大院生命・特任教授）

いままでの分子科学とは異なる、新たな研究分野を作るための準備ができていることがわかる。班を超えた共同研究が進んでいることを聞き、異分野交流が進んでいることがわかった。複雑系の解明は正しい方向であり、それを柔らかな分子系という良い切り口でまとめて理論、計測、創成のメンバーが集まっているのが大変良い。本領域が新たな分野を切り開くことを期待している。また、若い人がジャンプアップするために、合宿会議で若い芽を見つけて育ててほしい。

大峯 巖（自然科学研究機構・分子科学研究所・所長）

全体的にハイレベルである。柔らかな分子系には基本原理があるはずだ。その幾つかを切り出すようにしてほしい。柔らかさと同時に硬さもあり、stationary に動く系を作っているであろう。A01、A02、A03 が協力して全体像を明らかにしていくように、precise に理論として肉付け、観測できる計測手法を作り上げて欲しい。新たなコアを目指した議論を積極的に促進しても良いのではないか。この方向はポストイメージングサイエンス、ポスト一分子分光が可能であり、インテリジェントな分子を作り上げ、生命科学、脳科学に分子科学が浸透していく元になるであろう。ぜひ頑張ってください。

渡辺 芳人（名古屋大学大学院理学研究科・教授、理事、副総長）

この領域はバイオも強いが他の分野も入っているのが良い。たとえば、柔らかさの観点で活性中心に対して第 2 配位圏まで考慮するように、これまでの自分の系ではなく新しい系にチャレンジして成果を挙げていく志をこの領域で育ててほしい。

国際評価委員

M. Sheves (Professor, Weizmann Institute of Science, Israel)

The understanding and creation of functional complex molecular systems are in the focus of frontier science. These systems are based on their ability to adopt flexible structures and conformations leading to a variety of functions. Therefore, I find the new effort and initiative "Studying the Function of Soft Molecular Systems by the Concerted Use of Theory and Experiment" based on the effort of three research groups as very timely and important. The science that was presented during the meeting was of high quality, and I am

sure that the collaboration between the three groups will result in excellent science, development of new methodologies and will shed further light on our understanding of the molecular mechanism of soft molecular systems.

機能性分子システムの理解と創成は科学のフロンティアの焦点である。これらのシステムは構造や配向を自在に適合させる能力に基づき様々な機能を生み出している。したがって、3つの研究班による本新学術領域「理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学」はまさしく時期を得たものであり極めて重要である。ワークショップで発表された研究は質の高いものであり、私は3つの研究班による共同研究が素晴らしい研究と新たな方法論を作り出し、柔らかな分子系の分子レベルのメカニズムを解明することを確信している。(第1回ワークショップ”What is soft molecular system?” (平成26年3月10日～11日、諏訪市)にて評価)

J. E. Straub (Professor, Boston University, USA)

The overview presentations from team leaders provided background on the inspiration for this ambitious collaborative research program, as well as a description of the research teams in the areas of synthesis, simulation, and analysis. There is a clear and strong connection to the theme of exploring "soft molecular systems" and an obvious synergism between the three teams. I have no doubt that we will see great work done by the research teams, leading to new methodologies and insights into the function of soft molecular systems.

領域代表と班長による概要説明から合成、シミュレーション及び計測領域の研究チームの構成とこの野心的な共同研究プログラムを着想するに至った背景を知ることができた。3つの研究チームには「柔らかな分子系」を研究する明確で強い関係があり、明らかにシナジー効果がある。この研究グループが素晴らしい成果を上げ、新たな方法論と柔らかな分子系の機能に対する新しく深い理解をもたらすことに全く疑念の余地はない。(第1回ワークショップ”What is soft molecular system?” (平成26年3月10日～11日、諏訪市)にて評価)

S. R. Meech (Professor, University of East Anglia, UK)

The “Soft Molecular Systems” programme has set itself very ambitious goals, but has designed a programme and a team capable of delivering them. The range of expertise assembled is truly impressive, and the theme leaders and the associated research teams contain a good mix of senior, mid- and early-career scientists. Appropriate management to ensure the development of interdisciplinary research collaborations and the training of young scientists is in place. The early research outputs are of the highest quality.

新学術領域「柔らかな分子系」は非常に野心的なゴールを設定しているが、プログラムとチームはこれを達成できるようにデザインされている。集められた専門家の範囲はまさしく印象的であり、班長と率いるチームはシニアから中堅、若いキャリアの研究者が程よく混じっている。学際的な共同研究を確実に推進し、若い研究者を鍛錬する適切なマネジメントが順調に運営されている。初期の研究成果は最高の水準である。(日本化学会春季年会 (平成27年3月26日～29日、日大船橋)に参加し、関連班員の発表及び領域説明を受けて評価)

上記3名の国際評価委員に加えて P. M. Champion (Professor, Northeastern University, USA) 国際評価委員を本年7月9日～12日に行われる第1回国際会議 (東京・日本科学未来館) に招き、本領域の研究内容及び運営に関する評価書を作成していただく予定である。

10. 今後の研究領域の推進方策（2ページ程度）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

柔らかな分子系というキーワードのもと、右図に示すようにこれまでは別々に展開してきた3つの異なる研究分野が強く連携、融合することによって複雑分子系を総合的に研究する新しい学術領域が形成されようとしている。具体的には、①量子力学・分子動力学を駆使して複雑分子系の構造変化と分子機能の定量的解析と予測をする理論的研究、②先端的計測法を開発・駆使して複雑分子系の機能発現の機構や構造形成過程の過渡的構造とそのダイナミクスを研究する実験的研究、③超分子やタンパク質などの複雑分子系の新たな機能を創成する合成化学・遺伝子工学的研究が連携・融合して新領域を形成しつつある。計画班と公募班が一体となった研究推進によってレベルの高い研究成果が得られ、共同研究によるものも含め、すでに数多くのハイ・インパクトファクターの雑誌に論文が掲載されている。

これから分かるように、われわれの進めてきた本研究領域の推進方針は大きな成果をあげつつあるので、基本的には今後もこれまで同様の方針に基づいて強力に研究領域の推進を行う。加えて公募班の入れ替えの際に現在我々が想定していない新たなアイデアの研究者を本領域に加えて組織を強化し、新たな班内および班間共同研究を積極的に推進してさらなる活性化を図る。

新しい研究領域の創成のためには、個々に高い成果を上げている研究者が如何に相互理解に基づいて連携するかが極めて重要である。本領域ではすでに多くの班内・班間共同研究が始まり、多くの成果が得られつつあるが、これらのほとんどは、これまで開催した公開シンポジウム、合同班会議、ワークショップにおける討議から開始された。特に、従来では困難であった、例えば最先端の量子化学計算を行う研究者と新規な分子を合成する研究者との間の共同研究でもすでに成果が上がっている。またこのような専門を異にする研究者との密なる討論はそれぞれの研究者に新しい視点を開くものであり、個々の研究をさらに活性化する。したがって、これらの行事をさらに継続して行い、個々の研究者の活性化と、それらの間の連携を強化していく。また今後は、新学術領域で得られた研究成果をさらに積極的に国内外に発信することが重要であると考えている。これを実行するために今後は以下の行事を行う。

平成 27 年度

- ・第3回 公開シンポジウム（国際シンポジウム、7月9日～11日、東京・日本科学未来館）
- ・第3回 合同班会議（11月24日～26日、北九州市）
- ・ワークショップ開催、7回程度
- ・若手海外派遣 10名（派遣者決定済）
- ・共同研究推進援助 2グループ程度
- ・アウトリーチ活動（公開シンポジウムと同時に開催）

これらの本領域の行事に加えて、平成 26 年度までに日本化学会、生物物理学会で行ってきたように、本研究領域のメンバーを中心としたシンポジウムを関連学会で開催する。

また、平成 27 年 12 月にはアメリカ合衆国ハワイにおいて環太平洋国際化学会議（Pacifichem2015）が開催されるが、計画班員がオーガナイザーとなっている以下の5つのシンポジウムが開催される



ことが決定している（下線が本領域の計画班員）。これを通して本領域の研究成果を広く世界に発信し、国外の研究者との連携を図る。

- Symposium #437: Recent Experimental and Theoretical Advances in Studies of Liquid Interfaces (Organizers) Tahei Tahara (Japan), Akihiro Morita (Japan), Robert A. Walker (US), Liem X. Dang (US), Heon Kang (Korea), Shoichi Yamaguchi (Japan), Julianne M. Gibbs-Davis (Canada)
- Symposium #441: Interplay between Chemistry and Dynamics in Biomolecular Machines (Organizers) Shigehiko Hayashi (Japan), Akio Kitao (Japan), Young Min Rhee (Korea), Emad Tajkhorshid (US).
- Symposium #395: Chemistry and Applications of Retinal Proteins: From Microbes to Humans (Organizers) Leonid Brown (Canada), Hideki Kandori (Japan), Massimo Olivucci (Italy)
- Symposium #134: Chemical Imaging: Frontiers of Spatio-Temporal Resolution (Organizers) Masaaki Fujii (Japan), Seong Keun Kim (Korea), Makoto Sakai (Japan), Jau Tang (Taiwan), Bing Zhang (China), Piotr Piotrowiak (US)
- Symposium #438: Developments in Spectroscopic Investigation of Intermolecular Interactions and Dynamics of Molecular Clusters (Organizers) Hiroshi Sekiya (Japan), Timothy S. Zwier (US), Masaaki Fujii (Japan), Evan J. Bieske (Australia), Nam Joon Kim (Korea)

平成 28 年度

以下の行事を行うことを計画している。

- 第 4 回 公開シンポジウム（10 月頃、名古屋を予定）
- ワークショップ開催、6 回程度
- 第 5 回全体合宿会議（5 月頃、新潟を予定）
平成 28 年度には公募班の入れ替えがあるので、年度初めに全体合宿会議を開催し、新しいメンバーに本領域の目指すべきところを周知し、また従来からのメンバー間での再確認を行う。
- ワークショップ開催、7 回程度
- 若手海外派遣 10 名程度
- 共同研究推進援助 2 グループ程度

平成 29 年度

以下の行事を行うことを計画している。

- 第 5 回 公開シンポジウム（国際シンポジウム、6 月頃、札幌を計画）
- 第 6 回 全体合宿会議（新潟を計画）
- ワークショップ開催、7 回程度
- 若手海外派遣 10 名程度
- 共同研究推進援助 2 グループ程度

平成 30 年度

- 成果報告会（5 月頃）

以上の活動により「柔らかな分子系」をキーワードとする複雑分子系研究領域を確立し世界に発信する。