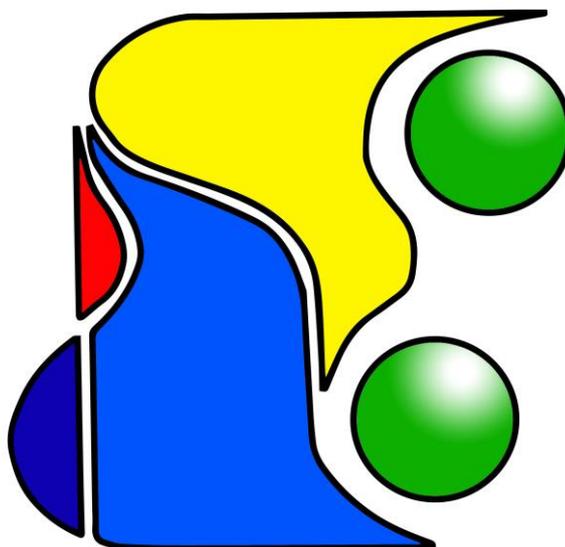


SPACC
先端錯体工学研究会

The Society of Pure and Applied Coordination Chemistry

News Letter (April, 2019)



SPACC ニュースレター
(2019年4月号)

目次

1. 研究紹介

●カロテノイドの吸収スペクトルの理論シミュレーション

関西学院大学 理工学部 浦上 千藍紗

2. 会員のご昇進のお知らせ

関西学院大学 理工学部 浦上 千藍紗

3. 日本化学会第99春季年会 特別企画

「革新的医工連携による次世代の疾病診断・治療技術の創製」を企画して

東京工業大学 生命理工学院 小倉 俊一郎

4. 会員の関与する学会のご案内

関西大学 化学生命工学部 中井 美早紀

5. SPACC 年会費納入と学生会員ご入会のお願い

6. 今後の行事予定一覧表および事務局からのお知らせ

★賛助会員からのお知らせ

1. 研究紹介

カロテノイドの吸収スペクトルの理論シミュレーション

関西学院大学理工学部環境・応用化学科橋本研究室

浦上千藍紗

e-mail: chiasa.uragami@kwansei.ac.jp

要旨：天然に広く存在する色素、カロテノイドは光合成に置いてクロロフィルに次ぐ、非常に重要な色素分子である。光合成における、カロテノイドの重要性はよく知られているが、カロテノイド分子の光物性に関しては未だに解明されていない部分がある。本研究では、カロテノイドの吸収スペクトルをブラウン振動子モデルを基に、理論的にシミュレーションし、カロテノイドと周辺分子の相互作用に関して知見を得た。

カロテノイド分子の吸収スペクトル

カロテノイド分子はイソプレノイド鎖、末端間構造、官能基の三つの要素から構成されており、その構造の単純さから、電気的特性も容易に予測できると思われがちである。カロテノイドのイソプレノイド鎖のみに着目して考えるような場合においては、共役鎖長と電子エネルギー準位の相関があることがわかっており、カロテノイドの電気的特性は現代分子物理学の予測に従った傾向を示す[1,2]。しかしながら、図1に示すように、同じ共役鎖長を持っているカロテノイド分子であっても、吸収スペクトルの振動構造は異なっており、共役鎖の長さだけでは吸収スペクトルを予測することは困難である。このようにカロテノイドの電気的性質のすべてを予測、理解するには依然として多くの情報が不足している。

カロテノイドの電気的性質を調査する最も簡単な方法は吸収スペクトルの測定である。しかしながら、共鳴ラマンスペクトルから吸収スペクトルをシミュレーションすることも有効な方法の1つである。この理由から我々は末端環構造をもつ15種類のカロテノイドについて、共鳴ラマンスペクトルから吸収スペクトルのシミュレーションを行い、この問題にアプローチした。

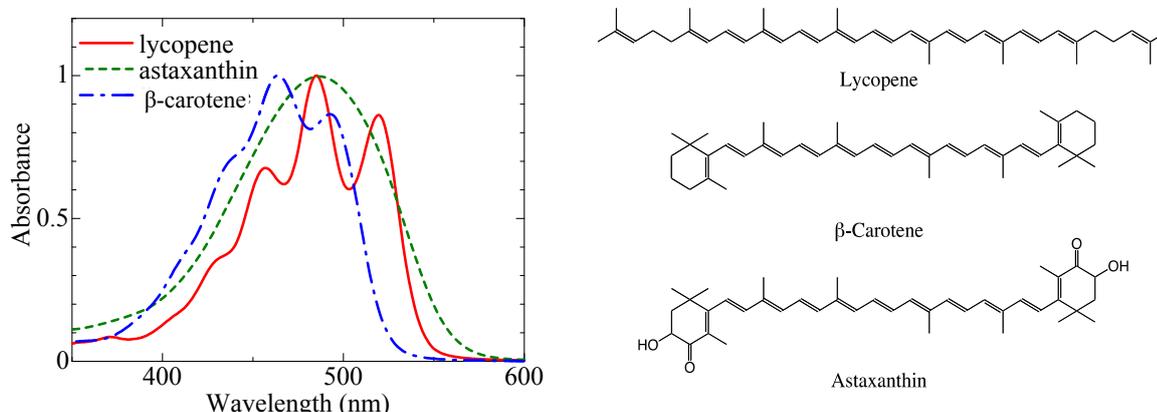


図1：カロテノイドの吸収スペクトル(左)と各カロテノイドの化学構造(右)。

吸収スペクトルのシミュレーションと実験結果との比較

本研究においては、カロテノイド分子を溶媒中にてブラウン運動を行う振動子に見立てて、シミュレーションを行った。今回のように、原子や分子のスペクトルから、物質粒子の運動の様子を知りたいような場合、次のようなことを想定する。

- スペクトルの形状は電子と溶媒粒子の相互作用によって決まる。
- 電子との相互作用の結果として、振動子の振動数はランダムに変調される。この変調は電子と振動子との相互作用を基に確率過程として記述することができる。

吸収スペクトルをシミュレーションするような場合、電子への相互作用による影響を適切な確率過程によって記述することが重要である。本研究においては、この確率過程を Gauss 過程であるとして、シミュレーションを行った。

シミュレーションを行うにあたって、スペクトル、振動子の運動 x の相関関数と、振動子の振動数 ω の相関関数は、図 2 のような関係にあるということを利用した。これら 3 つ要素の関係において、スペクトルと x の相関関数の関係と、2 つの相関関数の関係は自明である。しかしながら、 ω の相関関数とスペクトルの関係は ω がランダムな変調を受けるため、通常決めることは困難である。これを本研究では、 ω のランダム変調が Gauss 過程にしたがって起こると仮定することによって、スペクトルと ω の相関関数の関係を決めた。具体的な計算を実行するにあたっては、粒子の基底状態と励起状態のポテンシャル曲面は理想的な放物線を描いていると想定し、計算を 15 種類のカロテノイドに関して行った(計算の詳細は著者論文[3]を参照していただきたい)。

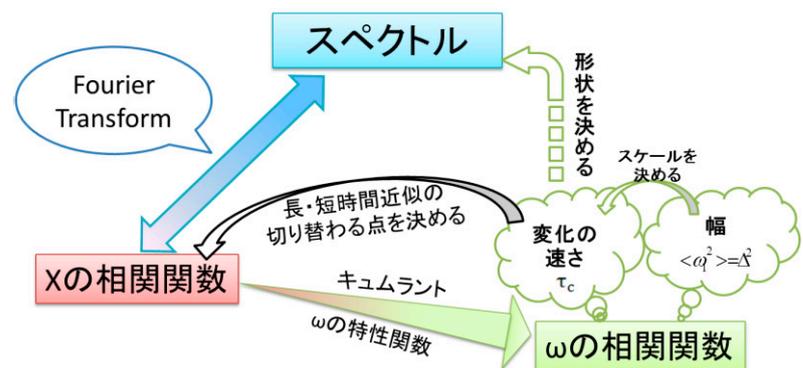


図 2: スペクトルと、 x の相関関数、 ω の相関関数の関係の模式図。

シミュレーションの結果と実験結果を重ねたものと図 3

に示す。計算の結果得られるパラメータは、再配置エネルギーと、平衡位置からのずれに関する因子である、Haung-Rhys 因子の 2 つである。得られたパラメータと実験から得られた値の相関をとると、いくつかの相関において線形な関係を見いだすことができた。その中でも注目すべきは、再配置エネルギーと吸収スペクトルの最低エネルギーバンド (0-0 遷移) のバンド幅との相関である(図 4)。この関係より、吸収スペクトルの形状は Haung-Rhys 因子に強く依存していることが明らかになった。また詳細は記述できないが、特定の官能基を持つカロテノイドには、今回の計算ではシミュレーションできないような、特有の相互作用が作用していることが示唆され、カロテノイドの吸収スペクトルを理解するには官能基や周辺分子との相互作用が大きく関係していることが示唆された。

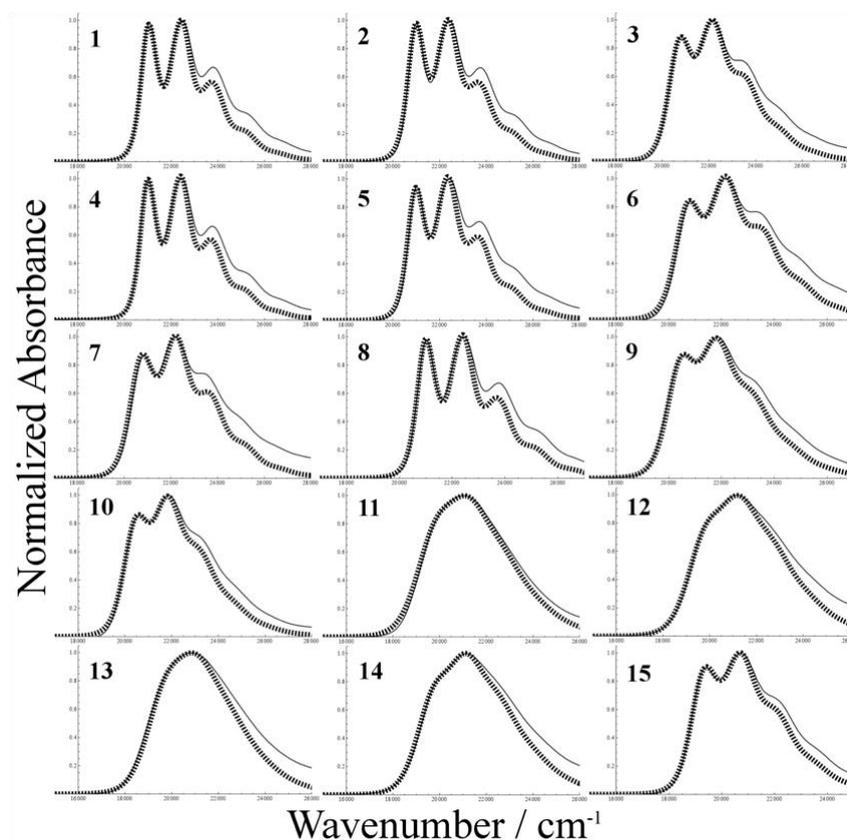


図3：15種類のカロテノイド吸収スペクトル(実線)とシミュレーションの結果。スペクトルはそれぞれ1: Lutein-5,6-epoxide, 2: Syn-syn Violaxanthin, 3: syn Antheraxanthin, 4: syn-syn Violaxanthin diacetate, 5: Violaxanthin diacetate, 6: anti Antheraxanthin, 7: Lutein, 8: Violaxanthin, 9: β -carotene, 10: Zeaxanthin, 11: Canthaxanthin, 12: Capsanthin 13: Astaxanthin, 14: Capsorubin, 15: Capsorbin diacetate のもの。

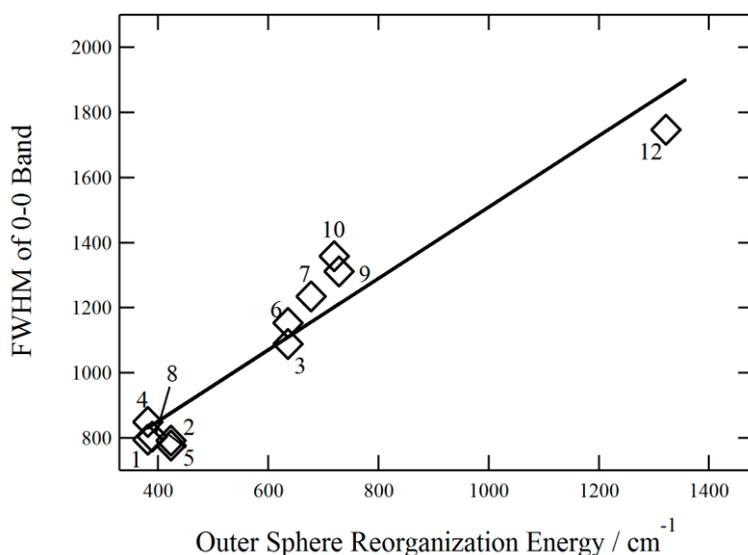


図4：再配置エネルギーと0-0遷移バンドのバンド幅との相関関係。該当するカロテノイドは図3と同じ。

おわりに

本稿では、著者の行ったカロテノイドの吸収スペクトルのシミュレーションに関する研究を、かなり駆け足で紹介した。説明不足な点も多々あるとは思うが、興味を持っていただけたなら、光栄に思う。また、ご意見、ご質問など頂けたらとも思う。

- [1] H. Nagae, M. Kuki, R.J. Cogdell, Y. Koyama, Shifts of the $^1A_g^- \rightarrow ^1B_u^+$ electronic absorption of carotenoids in nonpolar and polar solvents, *J. Chem. Phys.* 101 (1994) 6750-6765.
- [2] R.L. Christensen, E.A. Barney, R.D. Broene, M.G.I. Galinato, H.A. Frank, Linear polyenes: models for the spectroscopy and photophysics of carotenoids, *Arch. Biochem. Biophys.* 430 (2004) 30-36.
- [3] C. Uragami, K. Saito, M. Yoshizawa, P. Molnár, H. Hashimoto, Unified analysis of optical absorption spectra of carotenoids based on a stochastic model, *Archives of Biochem. Biophys.* 650 (2018) 49-58.

2. 会員のご昇進のお知らせ

関西学院大学理工学部環境・応用化学科専任講師に就任して

関西学院大学 理工学部環境・応用化学科 橋本研究室 専任講師
浦上千藍紗

2019年3月まで、関西学院大学理工学研究科の博士研究員を1年8ヵ月、務めさせていただきまして、晴れて本年4月より、関西学院大学理工学部環境・応用化学科の専任講師(任期制)を拝命いただくことになりました。これもすべて、橋本先生や研究室の学生の皆様をはじめとした、多くの皆様のご指導、ご助力のおかげでございます。大学卒業時、今以上に研究者として、また人として、ひよっこだった私を、ここまで成長させてくださった皆様に、この場をお借りいたしまして、厚く御礼申し上げます。ありがとうございます。まだまだ若輩者でございますので、これからもご指導・ご鞭撻のほど、何卒宜しくお願い致します。

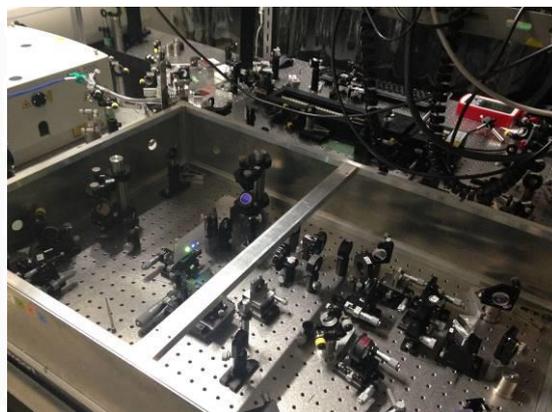
今回の職階から、教員というカテゴリーの職になり、就任式や、新任のオリエンテーションが予定されていたり、名刺を作っていたり、何もかもが博士研究員就職時とは大きく違っており、ただただ驚いております。また、ついに私も学生の皆様から“先生”と呼ばれる職になるのかと思うと、今から緊張してしまう小心者です。しかしながら、自分は“先生”であるという事実を重く受け止め、向き合い、責任をもって業務にあたりたいと思います。研究に対する姿勢も、これに伴い変化するような気がするのですが、対応していけるよう努力する所存です。幸いにも、博士研究員の時と同じ研究室にて、昇進というような形で新しい職につけました。研究に関して、このまま続行して「光合成の超高速レーザー分光を用いた機能・構造解明」を行えることは、この上なく幸運なことと思っております。また、関西学院大学橋本研究室はこれから、ますます発展していく研究室であると、確信しておりますので、私もその一助となれるチャンスがいただけたことは非常に嬉しく、期待に胸がいっぱいです。

関西学院大学の、美しい神戸三田キャンパスにおいて、これから多くの困難と試練と、喜びを経験できることを願って、就任のご挨拶とさせていただきます。

皆様これからも、どうぞよろしくお願いいいたします。



美しい関西学院大学神戸三田キャンパス



今後最も付き合いの長くなる実験装置

3. 日本化学会第 99 春季年会 特別企画

「革新的医工連携による次世代の疾病診断・治療技術の創製」を企画して

東京工業大学 生命理工学院

小倉俊一郎

e-mail: sogura@bio.titech.ac.jp

日本化学会第 99 春季年会において、SBIファーマ株式会社・高橋究先生とともに特別企画「革新的医工連携による次世代の疾病診断・治療技術の創製」を開催いたしました。春季年会最終日であり、医学と化学の連携ということで、どれくらいの人が集まるのかかなり不安ではありましたが、約 80 名の聴講があり、熱心に講演内容をメモしている方も多くみられ、化学からの関心が高いことを認識するいい機会となりました。

本企画では、以下の先生方にご講演いただきました。

- 医工連携による光線力学療法用次世代糖連結光感受性物質の開発 (奈良女子大学) 矢野 重信
- 小動物腫瘍に対する光線力学療法 (鳥取大学) 大崎 智弘
- 産学医工連携による 5-アミノレブリン酸 (ALA) の医学応用開発 (SBIファーマ株式会社) 高橋 究
- 癌治療の新戦略ーワールブルグ効果を逆手に取るー (高知大学) 井上 啓史
- 医工連携による超音波増感剤および免疫賦活剤の開発 (徳島大学) 宇都 義浩
- 鉄と病態との関連を探る新たな二価鉄蛍光プローブ分子の開発と応用 (岐阜薬科大学) 平山 祐

光線力学治療などの癌治療をはじめとして癌などのイメージングに至るまでの幅広い医工連携・産学連携に立脚した分野の紹介があった。特に光線力学治療の分野においては矢野先生ご講演の光増感剤の開発・大崎先生ご講演の小動物を用いた評価・井上先生ご講演の臨床的な総合評価と言った一貫した内容であった。さらに、高橋先生・宇都先生をはじめとした産学連携の講演や井上先生・平山先生の癌等のイメージングの話など、大いに盛り上がる内容であったかと思えます。

今回のこの特別企画では、医学と化学という異なる学術分野の中でも共通点や分野横断可能な領域が多々あることが示されたかと思います。先端錯体工学研究会や日本化学会の皆様の研究に、少しでも役立てていただければ幸いです。

最後になりましたが、本企画に携わっていただいた関連の先生・講師の先生、また先端錯体工学研究会の先生方に厚く御礼申し上げます。



講演者と座長の先生方

右から井上先生・高橋先生・大崎先生・矢野先生・宇都先生・平山先生・小倉

4. 会員の関与する学会のご案内

関西大学の中井先生より、以下のシンポジウムのご案内をいただきましたのでお知らせいたします。

第 29 回金属の関与する生体関連反応シンポジウム

The 29th Symposium on Role of Metals in Biological Reactions, Biology and Medicine (SRM2019)

主催：日本薬学会物理系薬学部会

共催：大阪大学大学院理学研究科

協賛：日本化学会、日本微量元素学会、日本薬学会環境・衛生部会

今回は The 15th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (ISABC15)のサテライトシンポジウムとして開催し、使用言語は英語です。

会期：2019年5月31日（金）～ 6月1日（土）

会場：大阪大学会館（豊中キャンパス）

一般講演：口頭発表とポスター（ポスター賞あり）

特別講演：Prof. Chris Orvig (The Univ. of British Columbia)

Prof. David Giedroc (Indiana Univ.)

各種締切

発表申込締切：2019年4月19日（金）

発表要旨締切：2019年5月1日（水）

参加申込締切：2019年5月15日（水）

申込先・問合せ先：大阪大学大学院理学研究科化学専攻 船橋靖博

e-mail: srm2019@chem.sci.osaka-u.ac.jp

本会 HP : <https://sciosaka.wixsite.com/srm2019>

5. SPACC 年会費納入と学生会員ご入会のお願い

先端錯体工学研究会(SPACC)会員の皆様におかれましては、常日頃より本学会の活動にご支援・ご協力を賜り、誠にありがとうございます。会員の皆様方には、会員係より年会費納入書類が郵送にてお手元に届きますので、そちらに従いまして年会費納入手続きのほど、何卒宜しくお願い申し上げます。学生様のご入会もお待ちしております。ご希望の場合、**1研究室あたり年会費1,000円**で、**20名様まで**入会・登録していただけます。ご入会いただけますと、SPACCの主催する国際会議、年会にご参加いただけるとともに、学生会員様はポスター賞へご応募いただけます！

[年会費]

・ 個人正会員

賛助会員: 50,000円, 正会員 : 3,000円

・ 学生会員 (1口) 1,000円

(1研究室で1口につき20名まで)

・ 法人会員 (1口)

維持会員: 10万円

一般会員: 2万円

期限: 4月22日

振込先: 先端錯体工学研究会

・ 振込用紙を用いた郵便振込
00130-7-773549

・ 銀行からのお振込
ゆうちょ銀行

(金融機関コード: 9900)
〇一九店 (店番: 019)
当座 0773549

* 学生会員の場合:

会費の振り込みの際は、担当教員名か研究室名を、通信欄あるいは振込者名に書き加えて下さい。

[入会手続]

・ 電子メールによる手続

以下のURLに記載されているフォームをダウンロードするかコピーして必要事項をご記入の上、jimukyoku@spacc.gr.jp宛に送信してください。

個人正会員用:

<http://spacc.gr.jp/page2e.html>

学生用会員: <http://spacc.gr.jp/page2f.html>

法人用: <http://spacc.gr.jp/page2g.html>

・ 郵送による手続

以下のURLに記載されているフォームをダウンロードして、必要事項をご記入の上、事務局宛に郵送して下さい。

個人正会員用:

<http://spacc.gr.jp/page2e.html>

学生用会員: <http://spacc.gr.jp/page2f.html>

法人用: <http://spacc.gr.jp/page2g.html>

郵送先

〒141-8648 品川区東五反田 4-1-17
東京医療保健大学大学院
医療保健学研究科
松村 有里子

6. 今後の行事予定一覧表および事務局からのお知らせ

ご案内

第29回金属の関与する 生体関連反応シンポジウム

場所: 大阪大学 (豊中キャンパス)

日時: 2019年5月31日(金)~
6月1日(土)

お問合せ: srm2019@chem.sci.osaka-u.ac.jp
(大阪大学 船橋靖博先生)

(詳細は、本号に掲載しております)

ニュースレター担当への問い合わせ方法

ご研究紹介等、SPACC ニュースレターへのご寄稿をしていただける場合や、本会が主催または協賛するシンポジウムの情報は、事務局までお気軽にお知らせください。

主催

The 26th International SPACC Symposium (SPACC26)

場所: グラスゴー大学(英国)

会期: 2019年12月12日(水)~14日(土)

担当: 橋本 秀樹 (関西学院大学)

お問合せ: hideki-hassy@kwansei.ac.jp

(詳細: 次号以降でお知らせいたします)

SPACCミニシンポジウム主催者募集

会員の皆様の活発な情報交換のため、ミニシンポジウムを開催していただける会員様を募集しております。研究会からの助成がありますので、ご興味のある方は事務局までご連絡ください。

先端錯体工学研究会事務局

E-mail: jimukyoku@spacc.gr.jp

東京医療保健大学大学院 松村有里子

信頼・実績 No.1 !
超純水装置 Milli-Q® Integral MT
 マルチアプリケーション対応装置・バリデーション可能



水質保証付き！ Water in a Bottled
分子生物学用水・細胞培養用水
 「水割」プランでお得にまとめて購入可能！



メルク 水割

検索



 **竹田理化工業株式会社**

本社 〒150-0021 東京都渋谷区恵比寿西2-7-5 <http://www.takeda-rika.co.jp>

営業本部 TEL.03(5489)8511
 東京支店 TEL.03(5489)8521
 西東京支店 TEL.042(589)1192
 千葉支店 TEL.043(441)4881
 筑波支店 TEL.029(855)1031

いわき営業所 TEL.0246(85)0650
 鹿島支店 TEL.0299(92)1041
 湘南支店 TEL.0463(25)6891
 横浜支店 TEL.045(642)4341
 三島支店 TEL.055(991)2711

埼玉支店 TEL.048(729)6937
 高崎支店 TEL.027(310)8860
 宇都宮支店 TEL.028(611)3761
 延岡事務所 TEL.0982(29)3602



**Fuji Chemical
Industries**



AstaReal
Be you, Just healthier

For People, Society, and the Future



Striving for Better Health Around the World

Pursuing Innovation to Create New Products and Services

- Contract Pharmaceutical Ingredients
- Contract Spray Drying Service
- Pharmaceutical Manufacturing and Contract Manufacturing
- Excipient Manufacturing and Sales
- Natural Astaxanthin