

# 大学院教育支援機構（DoGS）海外渡航助成金 報告書

## Outcome report

計画名 Plan	環太平洋国際化学会議 Pacifichem 2025 での研究成果発表
氏名 Name	安東 智大
研究科・専攻・学年 Graduate school/Division/Year level	理学研究科・化学専攻・博士後期課程 3年
渡航国 Country	アメリカ合衆国ハワイ（ホノルル）
渡航日程 Travel schedule	2025年 12月 14日 ~ 2025年 12月 22日

- ページ数に制限はありません。No limits on the number of pages
- 写真や図なども組み込んでいただいて結構です。You can include pictures or illustrations.
- 各項目について具体的に記述してください。Please fill in each item specifically.
- 日本語または英語で記載ください。Please use Japanese or English.

### 渡航計画の概要 Outline of the travel plan

本渡航計画の主たる目的は、アメリカ合衆国ハワイ・ホノルルにて開催された The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025: Pacifichem 2025（環太平洋国際化学会議）に参加し、口頭発表を行うことであった。

申請者は、量子化学計算と分子動力学シミュレーションを組み合わせた新規計算化学手法により、発光タンパク質イクオリンにおける生物発光メカニズムの分子論的な解明に取り組んでいる。これまでの研究で、化学発光反応における水分子の関与や、プロトン移動経路の探索、それらを誘起するタンパク質環境の大域的な構造変化など、従来の構造解析実験のみでは原理的に明らかにできなかった反応機構についての知見を得ることに成功してきた。

申請者が口頭発表を予定していたシンポジウムは、酵素触媒の分子基盤の理解をもとに、新規タンパク質昨日の創出について議論するものであり、計算化学や構造生物学など、実験と理論の融合的知見を得ることを主題として企画されたものであった。また、このシンポジウムは、計算化学、時空間計測、蛋白質分子開発技術の統合により、機能性タンパク質の創出を目指す、学術変革領域 A 蛋白質新機能生成（Generative Design to Unlock the Potential of Protein Function）の活動の一環として行われた。

本研究発表を通して、タンパク質構造変化とその分子機能との関係の解明と、それらの制御・応用への発展について数多くの研究者と議論することに加え、当該シンポジウム、領域の研究活動の推進に貢献することを目標に本渡航計画を立案した。

## 成果 Outcome

### ① 口頭発表による研究成果の公表

Pacificchem でのシンポジウム Atomistic Understanding and Design of Enzyme Catalysis Through the Lens of Protein Dynamics において、Theoretical study of the luminescent reaction process of bioluminescent protein Aequorin という題目で口頭発表を行った。

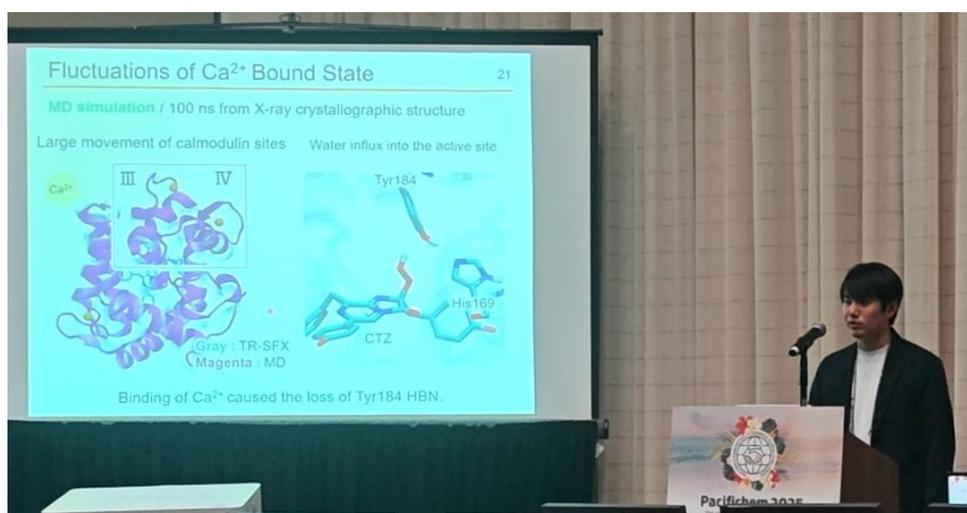
イクオリンの生物発光反応の計算化学的解析について述べるうえで、第一に、実験手法との違いや、理論・計算手法の詳細を明確に説明することを重要視したプレゼンテーションを心掛けた。本研究では、構造実験で得難い動的構造についての解析を、計算化学的手法を用いているため、実験手法の原理や先行研究の取り組みを踏まえたイントロダクションを行った。

また、計算手法としても従来のハイブリッド手法 (QM/MM 法) の改良・発展版として開発された新規手法 (QM/MM RWFE-SCF 法) を用いたことから、その相違点や優位性といった部分への説明を手厚く行い、計算化学研究者以外への理解も得られるような構成とした。

研究成果については、化学発光反応メカニズム解明において、理論化学的な手法だからこそ得られうる、反応中間体の構造最適化計算や、水素結合ネットワーク構造の解析、プロトン移動反応に沿った自由エネルギー計算による反応性の評価について述べ、エネルギー的に有利な化学発光反応経路と分子機構についての提案を行った。

また、それらの化学反応がタンパク質の構造変化によって誘起されるメカニズムについても示し、構造と機能の相関についても言及することができた。いただいた 25 分の発表時間の中で、生物発光反応の分子機構解析の研究成果について最大限に発信することができたと考えている。

また、質疑応答の中で、時分割結晶構造解析に取り組んでいる研究者から、結晶構造解析の詳細を中心に、実験と理論の補完性についての質疑、コメントをいただくなど、計算化学分野以外の聴衆にも一定以上の理解を得られ、関心を惹くことができたと考えている。



(写真) 申請者の口頭発表の様子

## ② シンポジウム・ポスター発表等での情報収集

本会議は、各国の化学会が集まる学術会議であったため、自身が関連する生物物理分野以外にも化学に関するあらゆる分野のシンポジウムやポスター発表が開催されていた。会期を通して、多くのセッションに参加し、知見を深めることができた。

申請者の専攻である理論化学、計算化学の最先端がどこまで到達したのかについてのアップデートを行えただけでなく、グリーンケミストリーや宇宙科学にまつわる研究など、今現在の世界の化学分野が目指している方向性やトレンドを知る機会にもなり、自分たちの研究も全く別の分野や方法論と組み合わせたりできるのではないかとといった新たな着想の種のようなものが得られたと感じている。

## 今後の展望 Prospects for the future

Pacificchem での研究発表を通じて、計算化学手法を用いたタンパク質中での化学反応・分子機能メカニズムの解明への取り組みについて広く発信することができたと考えている。

本学会で得られた知見や、いただいたコメントなどを共同研究者とも共有し、共同研究計画に反映させることで、実験と理論の相互補完性の向上について議論をさらに深め、イクオリンのタンパク質構造変化と化学発光反応の関連性の理解についての研究推進を加速させていく機会としたい。

今後も、計算化学の立場から生物発光反応機構解析に取り組み、国際誌への論文投稿や、博士論文の執筆へと繋げていく予定である。

また、語学力のさらなる向上の必要性を強く認識した機会でもあった。自身の研究内容をただ発信することはさほど問題なくとも、質疑応答まで十分に対応できたかと問われると、課題が残ったと言わざるを得なかった。特に理論と実験の融合研究の場では、それぞれの理解を合わせるためにも積極的な議論を英語で行えなければならない。そのために、今後より一層の鍛錬に励み、より深い相互理解を実現できるようにしたい。

海外渡航の実施にあたり、京都大学大学院教育支援機構（DoGS）には、本渡航計画を採択いただくとともに、海外渡航助成金による多大なるご支援を賜りましたことに、心より感謝申し上げます。

また、所属研究室ならびに関係各位のご指導や各種手続き等を含めた、多大なご支援・ご協力を御礼申し上げます。