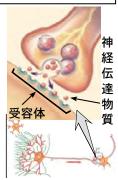
研究交流計画の目標・概要

[研究交流目標] 交流期間(最長5年間)を通じての目標を記入してください。実施計画の基本となります。 (自立的で継続的な国際研究交流拠点の構築と次世代の中核を担う若手研究者の育成の観点からご記入くだ さい。)

本事業は、DNA や神経伝達過程などの生体分子や超分子において重要な役割を果たしている**柔らかな分子同士の分子認識機構を、日独仏の分子クラスター研究チームにより分子間相互作用の観点から解明することを目標とする。**たとえば神経伝達過程の分子認識は「鍵と鍵穴」機構と呼ばれ、受容体のポケットと神経伝達物質の形や電荷の相補性に起因するとされている。しかし、受容体も神経伝達物質も現実の鍵と鍵穴のような剛直な固体ではなく柔軟性を有する分子であり、柔らかな分子同士がなぜ「鍵と鍵穴」と言われるくらいに僅かな分子構造の差を識別できるのか、明確に答えることは難しい。そこで本事業では、分子間相互作用を最も正確に調べられる気相分光法を得意とする日独仏の共同研究チームにより柔らかな分子の分子認識機構を解明する。日独仏の研究チームはそれぞれの得意とする研究手法や現象が相補的であり、共同研究により単独では得られない成果が期待され、自立的かつ継続的な国際交流が期待できる。また、それぞれの研究チームは若手研究者や大学院生を含んでおり、コーディネーター同士の信頼関係のもと国際共同研究に参加することで国際感覚豊かな研究者として成長し次世代に続く国際研究交流が期待できる。特に日本側は昇進1年以内の若手教授・准教授3名を含んでおり、継続性の高い国際研究交流拠点形成が強く期待できる。

[研究交流計画の概要] 我が国と交流相手国の拠点同士の協力関係に基づく多国間双方向交流として、どのように①共同研究、②セミナー、③研究者交流を効果的に組み合わせて実施するか、研究交流計画の概要を記入してください。

①共同研究:柔らかな分子の分子認識研究では、分子認識されない分子がなぜ不都合なのか、その原因解明が困難な点が課題である。たとえば β 27ドレナリン受容体はアドレナリン(右図)を認識し内部(ポケット)に捕捉した状態の受容体構造が X 線構造解析で決定された。一方、ノルアドレナリン(右図)は分子構造が酷似しているのに認識されない。しかし、従来の研究手法では分子が排除される機構の直接観測が困難であり、その原因・機構を調べることは極めて難しい。本事業ではこの問題を、分子認識を司る局所構造(受容体ポケット部分のペプチド)と信号分子(アドレナリンなど)との分子間錯体の分光研究で解決する。局所構造(部分ペプチド、日本側が供給)であれば分子認識される分子のみならず分子認識されない分子でも分子間錯体を形成でき、その分子構造を赤外分光(日独)、紫外分光(仏)と分子動力学計算(仏日)、量子化学計算(仏独日)から決定できる。両錯体の構造の差により、柔らかな分子に対する分子認識の条件・メカニズムを構造論的に明らかにする。これに付随し、構造に対する溶媒効果(独)、光学異性認識(仏)、生体金属イオン認識(日独)に関しても日仏独3カ国の多角的な国際共同研究



により解明する。これら共同研究のために相互に研究者・大学院生を派遣し、共同で測定を実施し、Zoom、Skype などの通信手段を活用して相互訪問していない時も日常的に討論し、国際共著論文として発表する。

②セミナー:共同研究成果を総合的に討論するセミナーを毎年2回、東工大、およびベルリン工科大またはパリ・サクレー大で開催する。ヨーロッパで開催する場合は拠点所属以外のヨーロッパ諸国の研究者や大学院生も参加できるため多角的な討論が可能であり、また、本事業を広く知らしめる効果も期待できる。

③研究者交流:データーを単に交換するのではなく、研究者を相互に派遣して共同測定する事で交流を深化させる。大学院生を若手研究者と共に派遣し、国際共同研究に参画するバリアを下げる。解析や共著論文執筆は Zoom、Skype によって日常的な討論で進める。特に日本側若手教授・准教授には国際共同研究のリーダーシップを取る機会を提供し、日独仏の若手研究者の討論を活性化して若手育成と研究者交流を進める。

[実施体制概念図] 本事業による経費支給期間 (最長5年間)終了時までに構築する国際研究協力ネットワ 一クの概念図を描いてください。

日本とEUから世界へ発信 創薬・超分子デバイスの理学的基礎

