

京都大学教育研究振興財団助成事業
成 果 報 告 書

平成24年 9月25日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団
会 長 辻 井 昭 雄 様

所属部局・研究科 福井謙一記念研究センター

職 名・学 年 福井謙一記念研究センターフェロー

氏 名 畑 中 美 穂

助 成 の 種 類	平成24年度 ・ 国際研究集会発表助成	
研 究 集 会 名	14th International Congress of Quantum Chemistry	
発 表 題 目	The mechanism of the reduction of nitric oxide in bacterial nitric oxide reductase: A DFT and ONIOM study	
開 催 場 所	アメリカコロラド州ボルダー コロラド大学ボルダー校	
渡 航 期 間	平成24年 6月25日 ～ 平成24年 6月30日	
成 果 の 概 要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input type="checkbox"/> 無 <input checked="" type="checkbox"/> 有(事業計画変更承認申請書)	
会 計 報 告	交付を受けた助成金額	150,000円
	使用した助成金額	150,000円
	返納すべき助成金額	0円
	助成金の使途内訳	渡航費の一部 150,000円 ----- ----- ----- -----
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。)	

平成 24 年度京都大学教育研究振興財団
国際研究集会発表助成報告書

京都大学福井謙一記念研究センター
フェロー 畑中美穂

研究集会名：第 14 回 国際量子化学学会

(14th International Congress of Quantum Chemistry)

開催場所： アメリカコロラド州ボルダー コロラド大学ボルダー校

開催期間： 平成 24 年 6 月 25 日 ～ 平成 24 年 6 月 30 日

国際量子化学学会は、国際量子分子科学アカデミーが主催する、量子化学の学会の中でも最も大きい学会の一つであり、電子状態計算の方法論の開発や、最近流行りのスーパーコンピュータを用いた巨大系への応用（生体分子や機能性分子、太陽電池、固体表面上での反応など）など、様々な分野の研究者が集まる会議である。本会議には、約 50 カ国から約 600 名の参加者があり、活発な議論がなされた。発表会場は一か所で、全てのセッションに参加することができるようになっており、29 件の招待講演と 274 件のポスター発表が行われた。また、研究テーマの細かい制約がなく、全てのセッションに参加できるため、同じ「計算」の分野でも、普段あまり勉強する機会のない分野で、どのようなことが注目を集めているのか情報収集したり、論文を読むだけでは理解できなかったことを直接質問したりすることができ、非常に有用な学びとなった。

私自身は、酵素の中で起こる反応メカニズムについて発表した。嫌気性呼吸のプロセスの中で、有毒な一酸化窒素 (NO) を無毒な亜酸化窒素 (N_2O) に返還する酵素を一酸化窒素還元酵素 (NOR) とする。この酵素は、好気性呼吸において酸素を水に還元する酵素 (CcO) を同じ祖先から進化したため、嫌気性呼吸から好気性呼吸への進化の謎を解き明かす鍵を握ると考えられている。NOR から CcO への進化の過程で大きく変化した点は二点ある。一つ目は、反応中心に含まれる金属が、ヘム鉄・非ヘム鉄から、ヘム鉄・非ヘム銅に変化したことであり、二つ目は、電子とプロトンの供給源が、共に細胞の外側にあったのが、プロトンの供給源が、細胞の内部になったことにより、プロトンポンプが生じたという点である。本研究では、NOR 内での還元反応機構について、量子化学計算を用いて調べることで、ヘム鉄・非ヘム鉄が、二つの NO 分子と共に五員環構造を形成するという役割を持つこと、非ヘム鉄近傍に存在するグルタミン酸がプロトン及び電子を五員環に渡すことで、五員環内の N-O 結合が切断し、 N_2O 一分子を生成することを明らかにした。また、反応中心を取り囲むタンパク質は、反応エネルギーに大きく影響を及ぼさないものの、反応中心の構造を制御する役割を果たすことも明らか

かにした。本会議では、私同様、巨大分子の量子化学計算を行っている研究者が多く参加しており、今後の方針について有意義な議論ができた。また、異なる分野の研究者とも議論ができ、自身の研究に新しい視点を取り入れることができた。

また、他参加者の研究発表では、開発段階の新しい量子化学計算方法についての未発表のデータを見せてもらうことで、自分の研究に応用できないか議論することができた。近年、本分野では、様々な計算の方法論が開発されているが、どの方法も、全ての分子系に応用できるわけではないため、それぞれの方法が自身の研究対象に適用可能かを見極める必要がある。このような情報は、多くは公に発表されていないので、開発者に直接会って話すことが最も有効であり、本学会は、そのための絶好の機会となった。

最後に、このような機会を与えてくださった貴財団及び関係者の皆様に心より御礼申し上げます。