客員所員を経験して

群馬大学　　樋山　みやび

2020 年度の 1 年間、客員所員として、受け入れ先の秋山英文教授ならびに秋山研究室のみなさんには大変お世話になりました。私は、2013 年から 2017 年まで、4 年ほど特任研究員として秋山研究室で過ごさせていただきました。この期間に、機能物性研究グループの杉野修教授、当時杉野研にいた野口助教(現静岡大准教授)、極限コヒーレント光科学研究センターの原田慈久教授と共同研究を進めることができました。

秋山研では、ホタル生物発光の基質であるルシフェリンと、発光体であるオキシルシフェリンの電子励起状態を解明するため、量子化学計算により吸収・蛍光スペクトルの解析を行ってきました。ホタル生物発光は pH や温度で発光色が変化します。この発光色を決定しているのはオキシルシフェリンであることは知られていますが、オキシルシフェリンにはケト型、エノール型、エノレート型が存在し、どの構造が発光色に関与しているか不明です。そのため、pH や温度で発光色が変化する理由を説明できるほど、発光メカニズムは解明されていません。

秋山研にて計算を進めて行くうちに、量子化学計算だけでは溶媒効果の扱いが難しいことがわかってきました。ちょうどその頃、野口助教との共同研究が始まり、溶媒の水分子を露わに取り入れたオキシルシフェリン水溶液の大規模分子動力学計算を行うことにより、「基底状態ではエノール型が安定になる」という結果が得られました。このとき得られた構造を用いて、オキシルシフェリン吸収スペクトル計算を行ったところ、実験吸収スペクトルをよく再現する結果となりました。野口助教との共同研究はさらに発展し、ケト型・エノール型・エノレート型それぞれに配位する水分子の様子が基底状態の場合と異なることから、「励起状態ではオキシルシフェリンのケト型が最も安定」という結果が得られています。

群馬大に移ってからは、物性研共同利用に申請することで、学生たちとともに秋山研での生物発光実験と物性研スパコンを利用した理論計算を行ってきました。今回の客員期間では、半年ほど県外への移動が規制されていたため、10 月からやっと物性研で実験を開始することができました。物性研からの支援により、群馬大の学生たちは比較的長期にわたり秋山研で実験することができ、群馬大で合成したケージド化合物の光解離実験や、ホタル生物発光の基質類似体を使った生物発光実験を進めることができました。また、物性研のスパコン利用に関して、大型計算機室のスタッフからのサポートを直接受けることができ、非常に助かりました。

客員所員の研究期間はあっという間に終わってしまいましたが、今後、物性研共同利用を申請して、共同研究を発展させていきたいと考えています。最後になりますが、秋山教授、杉野教授、秋山研のみなさん、大型計算機室スタッフのみなさんに改めて感謝したいと思います。