

---

**研究会報告**

---

**4th Mini-Symposium on Liquids****— Liquid in Life —**

開催日：2010年6月26日

場所：九州大学箱崎地区21世紀プラザI講義室

今回で、Mini-Symposium on Liquids も4回目になる。今年のシンポジウム講演では生物に関連する研究を中心に集めた。生物物理や生物化学では『生体分子の構造やある種の“やわらかさ”、“揺らぎ”が重要である』としばしば語られる。これらのキーワードのみでは内容が曖昧すぎるが、その構造や揺らぎを決めている最重要因子の一つは溶媒であると言っても良いであろう。事実、溶媒の状態（組成や温度など）が変わると生体分子の構造や性質は激変する。従って『“やわらかさ”や“揺らぎ”が重要である』であるならば、生体分子だけに注目しては、その機能の理解は困難と言えそうだ。そしてほとんど全ての生物化学現象が凝縮系、しかも大抵は水溶液中で起きている事を考慮すると、それらの現象には液体論としての側面がある事は言うまでもない。今回のテーマだけを見るとこれまでのシンポジウム[1,2]とは少々趣が変わったかのように見えるかもしれないが、液体の統計力学の原理的な理解への繋がりが期待できる研究を中心に講演をお願いした。特に生物に関わる研究では応用研究や個別性に光が当てられる事が多いが、このシンポジウムでは、逆に原理的な問題に関わる研究に光を当てたいと考えたからである。実際、原野氏、墨氏、横川氏らの講演からは溶液中の生体分子研究を志向した理論開発が液体論の基本的な課題の理解や統計力学の手法を前進させる事に繋がりを感ぜられた。また、伊藤氏、神山氏らの講演からは、一見古典的な測定量や原理をもう一度問い直し、押さえ直す事が理論を前進させるために極めて重要である事が示された。さらに、生体のエネルギー論の理解には、Static な熱力学量の評価をこえて非平衡統計物理へ歩みを進める必要性がありそうである。進んだ先にもシンプルな理解と原理への繋がりがあふることが、分子モーターで散逸する熱を見積もる研究（鳥谷部氏）から示されたと思う。こうしてシンポジウム報告をまとめてみると、生物へのアプローチは応用ばかりでなく、基礎への道でもあることが分かると思う。

今回は、ポスター講演に関して新しい試みを行った。講演開始前（午前）と、講演と講演の間（午後）の合計2回のポスター発表の時間を設定した。これは、前回ポスターの時間が十分ではなかったことを受けての事である。他の研究会の方法[3]を踏襲したやり方だが、午前から活発な議論が行われていてよかったと思う。

## 謝辞

次に示すプログラムにある講演者の方々には講演を引き受けていただき、専門的な内容や用語についても分かりやすい説明を行う為の工夫をしていただいた事を感謝したい。前回同様ポスター発表も非常に興味深いものが多かった。発表者の方々に感謝したい。今回は周知期間が短かったが、これまで通り多くの方が参加し議論を盛り上げてくれた。最後に大雨の中をお集まりいただいた全ての参加者の方々に感謝したい。

世話人

秋山良

甲賀研一郎

## 参考文献

[1] 甲賀研一郎、秋山良、物性研究 93(2009), 284.

[2] 秋山良、甲賀研一郎、物性研究 91(2009), 700.

[3] The Berkeley Mini Statistical Mechanics Meeting (<http://gold.cchem.berkeley.edu/statmech/>)

## プログラム

10:00~11:30 Poster Session 1 with Coffee and Cookies

11:30~12:50 Lunch

12:50~13:00 秋山良 (九州大学)

Opening Remarks

13:00~13:30 原野雄一 (大阪大学)

Development of Predicting the Native Structure of a Protein Focusing on Water Entropy

13:30~14:00 伊藤忠直 (静岡大学)

The response of F-actin solution to osmotic stress

14:00~14:30 墨智成 (豊橋科学技術大学)

A possible mechanism of high-pressure unfolding of proteins: Formation of high-density hydration shell

14:30~15:00 Poster Preview

15:00~16:30 Poster Session 2 with Coffee and Cookies

16:30~17:00 横川大輔 (大阪大学)

Calculation of thermodynamic quantities based on DFT in the energy representation

17:00~17:30 神山匡 (近畿大学)

Partial specific volume, compressibility, and coefficient of thermal expansion of protein in solution

17:30~18:00 鳥谷部祥一 (中央大学)

Single-molecule nonequilibrium energetics of a molecular-motor F1-ATPase

## ポスターセッション

P1: K. Nishiyama (Shimane Univ., Japan)

Solvation dynamics of organogels detected by means of the time-correlated single-photon-counting method

P2: S. Hayaki (Kyoto Univ., Japan)

A Theoretical Analysis of a Diels-Alder Reaction in Ionic Liquids with RISM-SCF-SEDD Method

P3: T. Kaneko (Keio Univ., Japan)

The melting points and the diffusion of TIP4P water cluster studied by Multicanonical and NVT ensemble

P4: S. Wakai (Hiroshima Univ., Japan)

Effect of salts on ATP hydrolysis activity of extremely halophilic archaeon *Haloarcula japonica*

P5: K. Abe (Okayama Univ., Japan)

Freezing in one-dimensional liquids

P6: A. Ikeda (Tukuba Univ., Japan)

Mode-Coupling Theory as a Mean-Field Description of the Glass Transition

P7: Y. Karino (Kyoto Univ., Japan)

Free-energy analysis of the hydration effect on cytochrome c

P8: T. Ekimoto (Kyushu Univ., Japan)

Dynamics of super cooled liquids of hard sphere systems

P9: Y. Uematu (Kyushu Univ., Japan)

Rotational relaxation of solvents around an ion

P10: Y. Ide (Kyushu Univ., Japan)

Molecular recognition and dependence of selectivity on adsorbent shape

P12: R. Akiyama (Kyushu Univ., Japan) with R. Sakata and Y. Ide

Reentrant behavior in effective interaction between two like-charged macromolecule in electrolyte solution

P13: M. Yamanaka (Kyushu Univ., Japan)

Volumetric study on binding of alcohols to globular proteins

P14: O. Kuroda (Kyushu Univ., Japan)

Liposome deformation derived by the differences in pH and/or ion strength between inside and outside of the vesicle