

The 4th Joint Meeting of JSCTA and CalCon 開催報告

1. 開催の経緯と今回の概要

日本熱測定学会 (Japan Society of Calorimetry and Thermal Analysis, JSCTA) とカロリメトリー会議 (The Calorimetry Conference, CalCon) の第 4 回ジョイントミーティングが 2016 年 7 月 31 日 (日) から 8 月 4 日 (木) の日程で米国ハワイ州オアフ島のホテル Turtle Bay Resort で開催された。カロリメトリー会議は熱測定に関わる最古の学会であり、関集三会員 (故人) がカロリメトリー会議から大きな刺激を受けて本会の創立に力を尽くされたこともよく知られている。1990 年代中頃からの阿竹徹会員 (故人) の継続的な参加により本学会員とカロリメトリー会議の交流が密になり、2001 年の第 56 回カロリメトリー会議でジョイントミーティングの提案がなされ、その年のハフマン記念賞受賞者として参加していた (当時の) 徂徠道夫会長と八田一郎次期会長が国際電話でジョイント会議開催を決断され、その歴史が始まった。2003 年の第 1 回以降、4 年に一度のペースで開催が続けられてきた。第 4 回は当初 2015 年に予定されていたが、カロリメトリー会議が 70 回を祝う記念会議となることから本年の開催となった。本会が通常の討論会とは別会議としてジョイントミーティングを開催しているのに対し、カロリメトリー会議側は会議そのものをジョイントミーティングにあわせているという事情を反映している (このため、今回の会議は CalCon 側では第 71 回会議とカウント)。日本熱測定学会側の世話人は幹事会の承認の下、第 3 回に続き齋藤が担当した。

会議は以下の九つのシンポジウムで構成された。括弧内は Symposium Co-chair で、双方から出ている。

Tooru Atake Memorial Symposium -
The Sixth International Symposium
on New Frontiers of Thermal Studies of Materials
(H. Kawaji, Y. Nakazawa & D.P. Remeta)
Biomolecular Structure, Function, and Stability
(S. Kidokoro & R.D. Sheardy)
Macromolecular Association and Recognition
(H. Torigoe & C.A. Minetti)
Biopharmaceutical Applications and Drug Discovery
(E. Yonemochi & C.A. Montanari)
Colloids and Surfactants
(H. Matsuki & S. Keller)
Databases, Global Analysis, Modeling, and Simulations
(Y. Shimizu & K. Kroenlein)
Liquid Solutions over Extended Ranges of Temperature and Pressure
(H. Ogawa, J.-P. Glorier & E. Wilhelm)
Thermodynamic Properties of Ionic Liquids
(O. Yamamuro, B. Magdalena & J. Jacquemin)
Specialized Applications of Calorimetry and Thermal Analysis
(K. Saito & D.P. Remeta)

ここ数年、CalCon では個人名を冠した記念シンポジウムを含めるのが恒例であり、今回はジョイント会議の会議に力を尽くされた阿竹会員にちなんだシンポジウムが、The 6th International Symposium on New Frontiers of Thermal Studies of Materials を含める形で開催された。

発表は、3 件の受賞講演を含む全体講演 (質疑を含め 60 分) 9 件、招待講演 (30 分) 40 件 (Giauque 賞の学生講演 3 件含)、一般口頭発表 (20 分) 21 件、およびポスター発表 23 件であった。全体講演のタイトルは以下の通り。

Prof. John E. Ladbury (Leeds University, UK)
Calorimetric Input to Drug Development – Panacea or Pipe(line) Dream (Hugh M. Huffman Memorial Award)
Prof. Yasuhiro Nakazawa (Osaka University, Japan)
Investigation of π -Electron Systems with Novel Magnetic and Superconducting Features; A Thermodynamic Approach (James J. Christensen Memorial Award)
Dr. Marcelo Jaime (Los Alamos National Laboratory, USA)
The Adiabatic Physics of Magnetic Materials in Extreme Fields beyond 100 T (Atake Lectureship Award)
Prof. M. Thomas Record (University of Wisconsin, USA)
Solute Interactions and Their Relevance: For Biopolymer Self-Assembly
Prof. Ronald N. McElhaney (University of Alberta, Canada)
Effects of Cholesterol Precursors on the Thermotropic Phase Behavior and Organization of Lipid Bilayer Membranes
Prof. Vincent J. Hilser (The Johns Hopkins University, USA)
Thermodynamics and Dynamics of Cold Adaptation in Enzymes
Prof. Masayoshi Watanabe (Yokohama National University, Japan)
Ionic Liquids: Border between Ionic Liquids and Electrolyte Solutions
Dr. Takashi Makino (AIST, Japan)
CO₂ Absorption in Ionic Liquids over Wide Ranges of Temperature and Pressure
Prof. Reed M. Izatt (IBC Advanced Technologies, USA)
Thermodynamics, Green Chemistry, and Metal Separations: Looking into The 21st Century

会議は日曜 (31 日) 夕刻のレセプションではじまり、月曜から木曜まで、朝一番は全体講演、その後、2 会場に分かれての平行セッションとして運営された。火曜夕刻のポスターセッションはミキサーを兼ねた形式で、腹ごしらえの後、ポスターを前に議論が繰り広げられた。水曜午後はフリータイムで、希望者はワイキキへのエクスカーションに出かけた。これは、会場が日本人にとって代表的な観光地であるワイキキから遠いことを考慮しての初の試みだった。木曜夕刻には、すべての発表を終えた参加者が一堂に会したバンケットが開催され、本会の城所俊一会長もスピーチを行なった。

CalCon は最長の歴史を持つ熱測定関連の学会として、長年の分野への貢献を讃える Huffman 賞、カロリメトリーと熱力学の革新的な展開に贈られる Christensen 賞、40 歳以下の若手を対象とした Sunner 賞を長年に亘り選考・授与してきている。本年は、Huffman 賞が英国 Leeds 大学の Prof. John E. Ladbury に、Christensen 賞が大阪大学の中澤康浩教授に



Fig.1 View of the private beach of the conference venue, Turtle Bay Resort from a guest room.



Fig.2 Prof. S. Kidokoro, the president of JSCTA, giving the address in the banquet on Thursday.



Fig.3 Profs. D. P. Remeta (Program Chair of CalCon, left) and R. Sheardy (Conference Chair of CalCon, right) in the banquet on Thursday.

授与された。また、学生を対象とした Giaque 賞が筑波大学の中澤暦さんを含め 3 名に授与された。授賞式はバンケットの中で行われた。Sunner 賞の受賞者が無かったことは、分野の将来を考えると少し残念なことだった。日本人受賞者については別項を参照されたい。

今回の参加者は同伴者をふくめ 100 名を越え、さらに、その内の過半数を日本からの参加者が占めた。準備段階では、情報が少ない、CalCon 側のレスポンスが遅いなど、様々な問題もあり、参加者のみなさんにも多大なご迷惑をおかけした。ここで改めて世話人としてお詫び申し上げます。参加したみなさんの感想を伺うと、概ね満足していただけた様で安堵している。CalCon 側は大成功と評価しており、次回開催を当然のように準備しようとしている。開催後の非公式の意見交換では、今回の開催が本年となったように、記念の年との衝突を避けるために 5 年に一度の開催の方向でまとまりつつある。ホテルも大いに乗り気で、既に 2021 年の 8 月 1 日から 5 日を仮予約扱いにしたということである。ワイキキとは違ったハワイを体験できる機会でもある。ご期待あれ。(筑波大・齋藤 一弥)

2. Tooru Atake Memorial Symposium

今回のジョイントミーティングのキーイベントとなったのが故 阿竹徹先生の追悼シンポジウムである。阿竹先生が三年に一度、横浜、つくばで開催されてきた材料科学の熱



Fig.4 Dr. M. Jaime giving Atake Lecture showing the photo with Prof. Atake.

測定に関する国際会議 (The International Symposium on New Frontiers of Thermal Studies of Materials) をカロリメトリーコンファレンスの Condensed Matter セッションと融合させて記念シンポジウムとして開催することになった。日本側は川路 (東工大)、中澤 (阪大)、CalCon 側は Rutgers 大学の D. Remeta 教授が組織を担当した。セッションは 1 日、2 日の午後と、エクスカージョンのある 3 日はさみ 4 日の午前中まで行われ、20 件の講演と 7 件のポスター発表があり、北米、ヨーロッパ、日本を含むアジアの計 8 カ国から多くの参加者があった。またこのシンポジウムから選ばれる Atake Lectureship Award の受賞者である米国ロスアラモス国立研究所の M. Jaime 博士による全体講演 (Atake Lecture) がコンファレンス全体のオープニングレクチャーとして 1 日の 8:30 から行われた。Jaime 博士は超強磁場領域での遷移金属元素、希土類元素を含んだ金属間化合物の spin 状態をパルス磁場、定常磁場を用いた熱容量、磁気熱量効果によって詳細に調べ、非平衡極限状態としてこれまでにない新規な量子磁気状態が存在することを指摘した。ロスアラモス研究所の磁場印加装置なども紹介しながら中身の濃い議論を展開し多くの質問があった。

1 日の午後のセッションでは、組織委員会から阿竹先生が大きく貢献されてきたハワイでのジョイントミーティングと材料科学の熱測定に関する国際会議の経緯と、今回のシンポジウムの趣旨に関する説明があった後、阿竹先生の奥様からのメッセージが紹介された。5 年の時がたちながら多くの研究者が集まりこのようなシンポジウムが開催されることを大変喜んでおられるとの内容であった。セッションはまず、「液体、ガラスのカロリメトリー」に関する分野からスタートし、オーストリア Wien 大学の E. Wilhelm 教授の液体の体積効果に関する理論サイドからのモデル解析に関する成果が発表された。続いて、ドイツ、Rostock 大学の C. Schick 教授によるマイクロチップと高速 DSC を用いた新しい視点からのポリマーの結晶化、ガラスに関する研究と、フランス グルノーブル国立研究所の Jean-Luc Garden 教授による PVAC のガラス化に関して微細加工したチップカロリメタを用いた最新の成果が報告された。さらに金属ガラスの相転移、ガラス化に関する断熱測定、構造解析に関する研究が内田博士 (日本大) から発表された。後半のセッションは「ナノ構造体」に関するセッションであった。招待講演であるアメリカ Brigham Young 大学の B. Woodfield 教授からナノ微粒子化したスピネル構造をもつ Fe, Co, Mn 等の磁性酸化物とその複合体における過剰熱容量に関する詳細な研究が報告された。その後、東大物性研の山室教授から Pd 微粒子における H_2 , D_2 の吸着とそのメカニズムの解明に関する中性子回折と断熱法による熱力学特性の解明に関する発表が続いた。また、ウクライナのハ

リコフにある Verkin 低温物理学・低温工学研究所から参加した M. Barabashko 博士からフラーレンのバンドルの表面に一次元的に配列したガス分子の凝集挙動やそのダイナミクスに関する断熱熱測定の結果が報告された。ウクライナの低温研究所は阿竹先生が以前から交流をもっておられ、断熱法による熱測定をはじめ熱伝導、熱膨張率などを測定するグループがあり、Barabashko 博士から阿竹先生が訪問されたときの写真なども紹介された。東工大の小宮山博士、国士舘大の名越博士からそれぞれ、MOF を使って作成した有機物の構造体と、多孔質内に閉じ込めたベンゼンの非常に得意な熱力学的性質について発表があった。

2 日は物質に重点をおいた熱測定を基礎にした物性研究、応用研究に関するセッションが組まれた。前半のセッションでは、群馬大学の花屋教授による色素増感太陽電池材料の特性向上に関する発表、横浜国立大学の一柳教授による有機分子でコートした磁性ナノ粒子を用いた交流磁場印加による大きな発熱効果を利用した医療応用に関する研究、大阪市大の吉野准教授による有機電荷移動塩を使った熱伝導、熱電効果の基礎研究に関する発表が続いた。いずれも物質開発と測定開発を結びつけた新しい展開が開かれているインパクトの高い発表であった。また、日本大学の橋本教授からセラミックスの微粒子化とその CO₂ 吸着挙動に関する熱測定の結果が発表され熱い議論がなされた。後半は低温での電子状態に関する固体物性研究がテーマとなり、招待講演の大阪府立大 細越教授から有機ラジカル磁性体の極低温の量子物性に関する詳細な熱容量測定、東大物性研の榊原教授による強い電子相関をもつ f 電子系の超伝導体に関する磁場方位を制御した角度分解磁気熱容量による超伝導の対称性に関する報告がなされた。大阪大学の今城氏も有機物の超伝導体で同様の実験を行った結果を報告した。東工大の木谷博士からはパイロクロ化合物と呼ばれるフラストレート系での熱膨張率の測定を用いたスピン系と格子系の相関に関する研究が報告された。

最終日のシンポジウム三日目は熱測定のより広範な領域への適用を意識したテーマでの講演がなされた。フランス Blaise Pascal 大学の Grolier 教授による高圧下での流体技術と熱分析手法を用いた Crude オイル技術とその応用にむけた取り組み、山口東京理科大の加納誠教授から環境熱測定と環境問題に関する日本の取り組みと現状・問題点に関する発表があり、その後、大阪大学の東氏から不凍タンパクによって作られる不均一な氷の熱測定に関する研究、筑波大学の齋藤教授による多機能性を組み込んだ長鎖分子を用いた多彩な超構造に関する示唆に富んだ報告があった。

分野が多岐に渡る盛りだくさんのシンポジウムとなったが、ほとんどすべての分野で阿竹先生がリードされ活躍されていたことを思うと阿竹先生の研究の幅と奥ゆきの広さを感じるシンポジウムであった。熱測定に関わる各国の錚々たる研究者に招待講演者として参加頂けたのも阿竹先生の交流の広さと学術に対する思いの深さによるものであると実感した。最後に D. Remeta 教授から哀悼の念とともに、クリステンセン賞、ハフマン賞をとられ学術的な貢献はもちろん、ハワイでの日米ジョイント開催を実現し、カルコンの発展と活性化に大きく貢献されたことに関する謝意が述べられた。懇親会の席では、阿竹先生はカルコンの Legacy となっており、今後も語り次がれるだろうという言葉が同先生からも発せられた。2007 年のジョイント開催の際にハフマン賞のお祝いをこの Turtle Bay のレストランで行ったのがついこの間のように思いだされた 4 日間であった。

最後に、本シンポジウム開催にあたり (株) システム・ブレインより寄付を頂戴しました。オーガナイザーとして心より感謝いたします。

(東工大・川路 均、大阪大・中澤 康浩)



Fig.5 Participants enjoying the last night of the meeting with live music during the banquet on Thursday.

3. 生体物質関連のセッション

今回のプログラムを見る限り、日米の熱分析研究の潮流の違いが明らかであった。日本の研究者の多くはマテリアルサイエンス (エネルギー素材、溶液、イオン液体、など) 及び熱測定の理論に関する発表が多くを占めていた。一方で、米国の研究者の発表では、生物関連物質 (タンパク質、核酸など) が多くを占めていた。その中でも、特に等温滴定カロリーメトリー (Isothermal Titration Calorimetry, ITC) を用いた研究報告が多く、セッションによっては、生物学、あるいはメディシナルケミストリーに関する学会であるかのような印象を受けた。さらに、ITC については、本会前に 2 日間のワークショップが開催されており、特にフォーカスされている熱分析の研究手法であるといえる。国内ではまだ割合は少ないものの、バイオ系の研究者が熱分析に入り込んできたことは、熱測定学会の時代の変化とも感じられた (実際、バイオ系の発表は若い研究者が多かった)。

生物・生体関連では概要で述べられた通り四つのシンポジウムが計画されたが、実際には発表内容を考慮して以下の様なテーマにセッションを再編して発表が行われた。

Macromolecular Interactions and Solvent Effects, および Protein Folding and Oligomerization のセッションでは、等温滴定カロリーメトリーによるタンパク質と薬物の相互作用の測定における、実験条件の影響が報告されていた。ITC による評価中のタンパク質の安定性には攪拌速度が影響することが示され、実験条件の妥当性には十分留意が必要であると警鐘されていた。また攪拌効率についても、均一化されやすい形状のパドルの有用性が示されており、ITC による結合評価においては種々パラメータの影響には十分な検討が必要であることが再認識された。

Methodology Approaches to Characterize Macromolecular Interactions, Nucleic Acid Structure and Interactions のセッションでは、ITC の活用として、タンパク質—低分子のみならず、タンパク質—タンパク質、タンパク質—DNA、低分子—低分子など、応用の幅が極めて広いことがメリットであると報告されていた。一方で、感度や精度、再現性など、分析科学的な観点での議論が不足しているとされ、今後の課題が浮き彫りとなっていた。

Protein Targets in Drug Discovery のセッションでは、ITC によるタンパク質と薬物 (リガンド) との相互作用、創薬研究への応用について研究が発表された。低分子医薬品と標的タンパク質との結合については、ITC により詳細な結合情報を得ることができること、また、このようなタンパク質とリガンドの相互作用について、熱力学データのデータベースも充実してきており、詳細な考察が可能となりつ

つあることが感じられた。ITC は、創薬研究の決定的なツールになるとは決して言えないものの、薬物とタンパク質の相互作用に関して、従来とは異なる側面からの情報が得られる手法として、有効であることが明らかであった。

Characterization of Lipid Bilayers のセッションでは、リン脂質二重膜の相転移挙動に対する膜内成分の影響に関する研究が報告されていた。発表内容は、細胞の分裂や融合など、細胞膜の多様な機能発現に対して、含有物がどのように影響しているのか、生物学的にも興味深い課題であり、その基礎となる重要な物理研究であると思われた。

Drug Delivery, Interactions, and Stability では、非晶質医薬品の物理的性質及び結晶化挙動に対する構造類似不純物の影響が報告されていた。仮想的な不純物を人為的に添加した非晶質を熱分析により評価しており、フラジリティパラメータおよび結晶化頻度の増加について、分子運動性との関係性、安定性が考察されていた。

その他、一般講演とは別に、2日の夕方 Malvern の技術者による ITC の基礎セミナーが催された。測定のコツ、ノウハウがわかり易く解説されており、若手の研究者には、非常に有意義な時間であった。

近年、熱測定の分野において、タンパク質などの生体試料を対象とした研究がかなり増加してきているが、これには、高感度な熱分析装置が普及してきていることが背景にある。特に、比較的バイオサイエンスに近い装置メーカーによる装置開発が活発と感じられる。これまでの本会に対して若干閉塞感が感じられていたものの、バイオ系の研究の参入は、この先にもまた新しい技術発展が期待できる部分があると感じられた。医薬品分野においても、従来の低分子化合物から、抗体、核酸などの高分子が増加し、また将来には再生医療など、細胞・組織を用いた医薬品も出現することが想定される。多様化、複雑化する物質に対して的確な品質評価を実施していくためには、従来の研究手法に限らず、新たな研究・分析技術の開発がこの分野の発展のための重要な課題であると考ええる。

(星薬科大・米持 悦生)

4. それ以外のセッション

イオン液体・溶液に関しては、横浜国立大学の渡邊正義氏および産総研の牧野貴至氏の全体講演に加えて、基礎物性量の測定結果、液体状態の理解を通じた基礎物性の探究 (ブリティッシュコロロンビア大・古賀)、イオン液体という特殊な環境での化学反応 (鹿児島大・神崎)、蒸気圧測定法 (ロストック大・Schick)、さらには物性予測 (バルファストクイーンズ大・Jacquemin)、温度と圧力を変数とした溶液物性 (名城大・方、東京電機大・小川) が報告された。ポスター発表ではより広範な物質と現象を対象とした研究が発表議論されていて、生誕関連物質との接点、イオン液体との接点などが見られたように感じた。

CalCon はもともと熱力学的な実験結果の不一致の原因を探り、その解決を大きな目的としていた。この意味でデータベースとモデリングのセッションは原点ともいえる。今回はあいにく米国 NIST のメンバーの参加が無かったため、日本側からの発表のみとなったが、金属精錬における熱力学データベースの役割 (岩手大・山口)、データベースに収載するに足る高分子の基礎データを実験的に得る方法の提案 (広島大・戸田)、純度標準物質の開発 (産総研・清水)、日本化学会が編集してきた化学便覧の歴史と課題 (筑波大・齋藤) が報告された。

ポスター発表は例年の CalCon では非常に少数であるが、今回は日本からの学生参加者の発表の増加もあって多かった。このため発表内容は非常に広く、特に物質の危険性

評価やロケット燃料の開発など、筆者にはあまりなじみの無い分野で熱測定が大いに役立っていることを知る良い機会になった。

(筑波大・齋藤 一弥)

5. ITC Workshop

今回、ジョイント会議に先立ち、7月30日と31日に CalCon のアウトリーチ活動として Turtle Bay にて開催された ITC Workshop に参加した。前回のジョイントミーティング (2011 年) でも ITC Workshop が開催され、今回が2回目の開催であった。参加者は5名で、講師は3名であった。今回も2011年と同様に、プログラム SEDPHAT による ITC データの解析に関するトレーニングが中心であった。SEDPHAT は、米国 NIH の Peter Schuck が開発した分子間相互作用パラメータを求めるプログラムで、生体分子の相互作用解析において非常に信頼できるプログラムとして認知されており、米国を中心に定期的に講習会が開催されている。日本熱測定学会でも2014年の第51回熱測定講習会において Schuck 博士らを招いた ITC ワークショップ・SEDPHAT 講習会を日本で開催している。今回の講習では、講師のうち2名 (Zhao 博士、Piszczech 博士) は、Schuck 博士のグループの研究者で、両講師により概要説明および生体分子の相互作用解析についての講習が行われた。また、ドイツの Keller 博士によりミセル形成やミセルと低分子との反応熱の解析方法についての講習が行われた。また、測定データからベースラインを適切に差し引き反応熱だけを正確に抽出するための新たなプログラム NITPIC や、SEDPHAT の解析結果を論文用の図として出力するためのプログラム GUSSEI についての講習も実施された。SEDPHAT は結合モデルが充実しており、かつ、結果の統計的検証やグローバル解析が可能であることから、年々、SEDPHAT による解析結果が論文に掲載されるケースが増えている。今回の講習会は、朝から晩まで窓が無い会場での実施で、参加者全員での屋外での昼食を除くと、折角のハワイのきれいな景色や雰囲気をほとんど経験することなく終了したのが残念であったものの、少人数に対して非常に丁寧に分かりやすいトレーニングが実施され、限られた時間ではあったが参加者にとって充実した時間となった。

(大阪大・内山 進)