

フロギストン

折り畳まれたタンパク質/ アンフォールドされたタンパク質 protein folding / protein unfolding

通常、タンパク質は分子内で塩橋や水素結合、疎水性コアを形成し、コンパクトに折り畳まれた状態（フォールドされた状態）で存在する。高温時や変性剤存在下では、タンパク質分子内のこれらの相互作用が切断されることで、構造の崩壊が起こる。この状態をアンフォールドされた状態と呼ぶ。また、フォールドされた状態のタンパク質が部分的に崩壊してアンフォールドされた状態に変化し、再びフォールドされた状態のタンパク質に戻ることを、リフォールディングと呼ばれる。（兵庫県立大学 神谷 成敏）

天然コンタクト native contact

天然構造が持つ原子間の相互作用ペアを天然コンタクトと呼ぶ。相互作用ペアは異なるアミノ酸残基間で定義され、原子間距離がしきい値よりも近接する際にコンタクトしたと判定される。天然構造として X 線結晶構造解析で得られた構造が用いられる。（兵庫県立大学 神谷 成敏）

マルチカノニカル MD multicanonical algorithm

マルチカノニカル MD (McMD) 法は、レプリカ交換法などの拡張アンサンブル法と呼ばれる MD シミュレーションの一種である。McMD 法は、計算系のポテンシャルエネルギーを関数とした重み因子を与え、これに対応するバイアス力を付加する。重み因子を適切に決めることで、常温から高温までの広い温度領域をランダムウォークできる。常温の MD では、安定な構造へのトラップが頻繁に起きて広い構造空間を探索することは困難であるが、McMD では広い温度領域のランダムウォークにより広い構造空間の探索が可能である。McMD のメリットは、広い構造空間探索による高い構造予測精度と、得られたトラジェクトリを reweighting することで物理化学的に許容されているカノニカルアンサンブルが得られることである。（兵庫県立大学 神谷 成敏）

磁気共鳴スペクトロスコピー (MRS) Magnetic Resonance Spectroscopy

MRS は、magnetic resonance spectroscopy としての磁気共鳴分光法と、magnetic resonance spectrum としての磁気共鳴スペクトルを指す場合がある。磁気共鳴は、NMR（核磁気共鳴：nuclear magnetic resonance）の磁気共鳴と同じであり、原子核が磁場の中に置かれたときに電磁波を共鳴吸収する現象である。物質ごとに違った周波数で共鳴吸収が起こるし、同じ物質でも内部の官能基ごとに異なった周波数で共鳴吸収が起こる。これは、原子核が受ける外部磁場が、分子内の電子により異なった影響を受けるからである。物質や官能基ごとに共鳴周波数が異なるので、この違いを化学シフトと呼んでいる。MRS という語は、主にヒトや実験動物を対象とした臨床診断や研究の場合に用いられてきた。Point Resolved Spectroscopy (PRESS) や Stimulated Echo Acquisition Mode (STEAM) と呼ばれる測定法を用いて、生体内で 3 次元的に関心領域を設定して非侵襲的にスペクトルが測定できる。ヒトの脳の場合は 1 ~ 2 cm の分解能で測定できている。実験動物では mm レベルの分解能である。PRESS や STEAM の 3 次元的な領域の選択は、比較的帯域の狭い電磁波パルスと次の MRI で説明する磁場勾配を複合的に用いることで行っている。（大阪大学 吉岡 芳親）

磁気共鳴イメージング (MRI) Magnetic Resonance Imaging

MRI は、magnetic resonance imaging としての磁気共鳴画像化法と、magnetic resonance image としての磁気共鳴画像を指す場合がある。用いている磁気共鳴現象は NMR と同じだが、MRI では、3 次元的な位置情報を取得できるようにするために、3 次元的な磁場勾配を作り出せるようにしている。例えば、X 方向に 10 cm で 1000 ppm の磁場勾配を作った場合、この方向に 1 cm 離れて水が存在すれば、磁気共鳴信号は 100 ppm 分だけずれて観測される。逆に、2 つの試料の水の磁気共鳴信号が、100 ppm 違って観測された場合には、場所が 1 cm だけずれていたことになる。3 次元的に磁場勾配を作って位置情報を盛り込んだデータを多量に取得し、立体的な画像として再構成している。PET や CT は密度を反映するが、MRI の場合は密度ばかりでなく、磁気共鳴特有の緩和時間を始め、拡散、磁化率、血流などの多様な情報を盛り込んだ撮像ができる。代表的な画像としては、プロトン密度強調画像 (proton density weighted image: PDWI)、 T_1 強調画像 (T_1 weighted image: T_1 WI)、 T_2 強調画像 (T_2 weighted image: T_2 WI)、拡散強調画像 (diffusion weighted image: DWI)、磁化率強調画像 (susceptibility weighted image: SWI)、磁気共鳴血管画像 (magnetic resonance angiography: MRA) がある。緩和時間、拡散係数、磁化率、流速などの数値そのものを画像にすることも可能である。目的とする画像（コントラスト）に応じて撮像法やパラメーターを変えている。ヒトであれば、平面分解能が 100~500 μm で厚さは mm レベル、マウスなどの実験動物では、平面分解能が数十 μm で厚さが 100~300 μm レベルでの撮像が行われている。（大阪大学 吉岡 芳親）

機能的磁気共鳴イメージング (fMRI) functional Magnetic Resonance Imaging

fMRI は、MRI と同じように imaging としての機能的磁気共鳴画像化法を指す場合と、image としての機能的磁気共鳴画像を指す場合がある。fMRI では、脳活動に伴う磁気共鳴信号の変化を画像化しているが、逆に、磁気共鳴画像からどのような脳活動が起こっているのかを推測することも行われている。脳活動と磁気共鳴信号の変化を対応させて初めて示したのが小川誠二先生である。活用したのは、酸素化ヘモグロビン (低スピン) と脱酸素ヘモグロビン (高スピン) の磁性である。脳活動に伴ってヘモグロビンの酸素化率が変化し、それが磁気共鳴信号にも影響するので、MRI から脳活動を知ることができる。小川先生は、blood oxygenation level-dependent (BOLD) contrast と命名した。現在は、BOLD コントラスト (BOLD 信号) のみならず、水の拡散、血流、血液量などに注目した fMRI も行われている。神経伝達物質のグルタミン酸やギャバも脳機能計測で注目されている。こちらは MRS を用いるので、functional MRS (fMRS) と呼ばれている。

(大阪大学 吉岡 芳親)

断熱型熱量計による 配置エンタルピー緩和時間の決定法 method for configuration enthalpy relaxation time using an adiabatic calorimeter

断熱型熱量計を用いた配置エンタルピー緩和時間はエンタルピー緩和速度 $dH_c(T, t)/dt$ および配置エンタルピー緩和量 $H_c(T, t)$ の示す結果を用いて、 $dH_c(T, t)/dt = -H_c(T, t)/\tau$ より温度の関数としての配置エンタルピーの緩和時間 τ を評価することができる。 $H_c(T, t)$ は温度 T 、時間 t における平衡値に対する配置エンタルピーであり、配置エンタルピーは時間経過に伴って指数関数的に緩和していることを仮定している。これらを用いて、断熱型熱量計より得られた急冷および徐冷試料の配置エンタルピー緩和時間を決定した。

(大阪大学 藤村 順)

ガラス形成液体における 緩和時間と粘性率の換算則 conversion laws for relaxation time and viscosity in glass-forming liquids

種々のガラス形成液体の α 緩和は緩和時間もしくは粘度をガラス転移温度 T_g で規格化した温度の逆数 T_g/T に対してプロットしたグラフを用いてよく議論が行われている。このグラフは最初に考案した人にちなんで Angell プロットと呼ばれる。一般的に緩和時間 τ が 10^2 s および粘性率 η が 10^{12} Pa \cdot s になる温度を T_g と定義している。本解説記事では Angell プロットのように温度の逆数に対して、緩和時間 τ をプロットし、それに合わせて粘性率 η を換算し、緩和時間および粘性率の温度依存性のグラフの結果を示している。

(大阪大学 藤村 順)