- 12) P. Hamm, M. Lim, W. F. DeGrado, and R. M. Hochstrasser, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **96**, 2036 (1999).

●著者プロフィール

氏名：谷村 吉隆 Yoshitaka TANIMURA
 所属：総合研究大学院大学数物科学研究科
 及び分子科学研究所 (〒444-8585 岡
 崎市明大寺町西郷中 38, <http://fuji.ims.ac.jp>, Email: tanimura@ims.ac.jp)
 役職：助教授
 趣味：登山(ヒマラヤ, アルプス, アラスカ等)

3 分子動力学シミュレーションによる 脂質二重層膜の構造と動力学

篠田 渉, 岡崎 進*

1 はじめに

分子動力学シミュレーションは近年の方法論の発展やコンピュータ性能の向上に支えられその研究対象領域を拡大し、今日では低分子系ばかりではなく高分子や液晶、さらに生体系のように複雑な系にまで適用されるようになった。その中で生体膜系への分子動力学シミュレーションの適用、研究は'90年代になって急速に展開した分野の一つである¹⁾。ここでは、生体膜の基礎骨格を担う両親媒性の脂質分子が水中で形成する集合構造、脂質二重層膜の分子動力学シミュレーションによる研究について紹介する。本報で対象とする脂質分子は、生体中で多く見られるホスファチジルコリン (PC) やホスファチジルエタノールアミン (PE) のようなリン脂質であり、2本の疎水性アルキル鎖とヘッドグループと呼ばれる双極性の親水性鎖を分子内に持つ。この一例として脂質二重層膜の研究において最も良く用いられる脂質分子、ジパルミトイルホスファチジルコリン (DPPC) を Fig. 1 に示す。

生体膜は一般に液晶状態にあり、構造だけでなくその動力学も生理現象に深く関わっていることが知られている²⁾。このため、モデル系として取り扱われる脂質二重層膜の研究の

多くは液晶相を対象としている。しかしながら、ここで見られる構造的に秩序の低い2次元液晶相に対して構造や動力学に関する分子論的な描像を得るには、実験的手法からでは自ずと限界がある。したがって、これまでの知見は断片的なものであった。つまり、実験データのみからでは膜の分子構造はイメージし難く、たとえば、ゲル相などで見られる脂質分子のアルキル鎖の集団的な傾斜構造が液晶相でも存在するかどうか、などは推測の域をでない。これに対し、分子動力学シミュレーションは、構造を直接取り扱うばかりでなくその時間発展をも追跡することのできる計算手法であることから、原子レベルでの脂質膜の理解において極めて有用な研究手法であるといえる。しかしながら、ここで注意しなければならないことは、分子動力学法で扱うことのできる空間・時間のスケールには限界があるということである。現在、脂質分子100個程度の膜断片の運動を数ナノ秒追跡することは可能であるが、たとえば脂質分子の膜内並進拡散や膜面の波打ち (undulation) が観測できる空間・時間スケールを計算の対象とすることは不可能である。これには分子モデルを粗視化するなど、また別の近似を取り入れなければならない³⁾。このような制限があるにも関わらず、原子レベルのモデルに基づく分子動力学法は他の手法では得られない情報を我々に与えてくれる⁴⁻⁶⁾。本報ではシミュレーションの方法論、膜系特有の取り扱い方法について簡単に触れた後、脂質二重層膜の構造、脂質分子のナノ秒までの運動に関するシミュレーション結果とともに、界面に形成される電気二重層の分子論、さらに界面付近での水の動力学について解説する。

2 アンサンブルについて

ここで本題に移る前に水中の脂質二重層膜系の計算技術として重要な項目について簡単に触れておく。最も重要な点はアンサンブルである⁶⁾。液晶相では分子構造の乱れがあるため初期配置は実験的に決定できず、計算上、人工的に作った任意の初期配置を用いる必要がある。それをいかに液晶相の平衡状態に到達させるかが計算を成功させる重要な因子となっている。特に、初期配置におけるストレステンソルの非対角項を0へと緩和させることが不可欠である。つまり、大き

Fig. 1 Molecular structure of dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC).

なひずみが残存したままシミュレーションを続けてもそれは不安定構造にすぎず、極端な場合には計算途中で膜が崩壊する。近年、等温等圧の NPT (N 粒子数, P 圧力, T 温度一定) アンサンブルの採用によってこの平衡化の問題に関する解決への糸口が見出され、さらに Parrinello-Rahman の圧力制御法⁷⁾によって上記の問題が回避できることが示された^{8,9)}。この手法の必要性に関してのさらなる解説は文献 10 を参照されたい。ただし、完全にランダムな初期配置から膜への自己集合構造形成過程をシミュレーションするには、现阶段では大幅な粗視化モデルを用いる以外に方法はない³⁾。

NPT アンサンブルの必要性は今では広く認識され、この手法はたとえ膜タンパクとの混合系であっても有効である。ここで近年議論となった NPT アンサンブルの外部設定圧力にして少し触れておく。通常、常圧における計算をする場合には等方的な外部圧力、つまり静水圧として 1 気圧 ($P_{\text{ext}} = P_{\text{ext}} \mathbf{I}$) を設定する。膜の断片を周期境界条件下においてシミュレーションする場合、界面における表面張力を考慮し、膜面方向へは負の (表面張力を打ち消すような) 外部圧力に設定すべきであるという意見が提案された^{11,12)}。しかしながら、表面張力は熱力学的に $\gamma = (\partial G / \partial A)$ と定義され平衡状態 (自由エネルギー G 最小) では γ は自動的に 0 になるものである。つまり、膜面積 A は、シミュレーションで考慮されていない外部の仕事によって決められているものではない¹³⁾。したがって、膜の場合においても静水圧下のシミュレーションが最も適当であるという見解が一般的である。表面張力を取りこむ発想の起源は空気/水の気液界面での脂質分子の作る単分子膜の表面張力測定からの類推によるもの¹⁴⁾であって、これは二重層膜の場合には当てはまらない。一方、Pastor らは、最大でも脂質分子 200 程度の系を周期境界条件下でシミュレーションすることによってリポソームで見られる膜面の波打ち運動が抑制されるが、この近似を表面張力で補正すべきであるという提案をした¹²⁾。この補正の是非は議論の最中であるが、これまでの表面張力を考慮しない静水圧下での多くの計算結果からは、補正の実質的な必要性が積極的に見出せない。計算の信頼性という面からすると、むしろ長距離相互作用の取り扱いや温度、圧力の制御法、計算時間などが結果に大きく影響すると考えられ、シミュレーションを行う場合には注意を払う必要がある。

3 膜分子の構造と運動

分子動力学シミュレーションの大きな魅力の 1 つは、分子構造の可視化である。Fig. 2 に平衡後の DPPC 二重層膜のスナップショットを示す。脂質分子のアルキル鎖の配向にはゲル相で見られるような集団的な傾斜構造は見られない。アルキル鎖の配向分布を取ると膜面に垂直な配向が最も多く、その分布の広さは $\pm 30^\circ$ 以上にわたって分布していることが明らかにされている。また、脂質分子のアルキル鎖領域への水分子の侵入は見られないが、脂質分子のエステル基付近までは浸透していることがわかる。界面はフラットではなく凹凸の多い複雑な構造を持つ。

Fig. 2 から分かるように、液晶相では脂質分子のアルキル鎖部分のコンホメーションの秩序低下 (メルト) が著しく、その構造や運動を見ることで脂質二重層膜の流動相の特徴を記述することができる。結晶相ではアルキル鎖中のすべての結合二面角はトランス状態であるが、液晶相では異性化が起

り、ゴーシュ構造が全体の 25~35 % まで増加する¹⁴⁾ (ゲル相では <10%)。このため、脂質分子は二重層膜という集合構造は保ちながらも非常にバラエティーに富んだコンホメーションを取り、さらに膜内において拡散定数 $\sim 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ で側方拡散し 2 次元液体として振舞う¹⁵⁾。なお、中性子準弾性散乱によって拡散定数 $10^{-6} \sim 10^{-7} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ が報告されているが¹⁵⁾、この運動は、拡散を示さないナノ秒オーダーの分子動力学シミュレーションから得られる分子の軌跡を用いて平均自乗変位をもとに計算した値と一致している。これにより、中性子散乱によって得られる見かけの拡散定数は、まわりの脂質分子が作る 'かご' の中での振動運動、つまり、秤動運動を反映していることが確かめられる。アルキル鎖の秩序状態を記述するには、 ^2H -NMR などの実験から求められるオーダーパラメーターが最も一般的に用いられている。オーダーパラメーターは C-H (deuterium) ベクトルの運動に対する空間的な制約の大きさを表す指標であり、次のように定義される²⁾。

$$S_{\text{CD}} = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle$$

ここで θ は C-H ベクトルと膜面垂直軸のなす角度である。オーダーパラメーターはシミュレーションからも簡単に計算することができ、Fig. 3 には DPPC の例を示す。ここで、炭素原子の番号は、エステル炭素から末端炭素に向けて、1 から 16 まで振っている。計算されたオーダーパラメーターは実験値を良く再現している。液晶相における特徴は、アルキル鎖の中央部分でオーダーが一定値を取り、末端部分で大きくオーダーが下がることである。また、sn-1, 2 の両アルキル鎖にはエステル基付近 (小さな番号の炭素) を除いてほとんど差がない。エステル基付近においては sn-2 鎖のオーダーが特異的に低くなっていることがわかるが、これは sn-1 鎖がグリセロールからまっすぐ伸びているのに対して sn-2 鎖は sn-1 鎖と平行な並びを形成するためにエステル基付近において折れ曲がり構造を持つためであることがシミュレーションによって判明した。二面角を調べることでゴーシュ構造がこの位置で特異的に多くなることもわかってきた⁹⁾。

脂質分子のコンホメーションの変化は、分子内の二面角のトランス・ゴーシュ異性化運動によって記述することができる。このために、状態関数

Fig. 2 A snapshot of the DPPC bilayer at 25 wt% water in the liquid crystal phase. The frame denotes the simulation box. Lipid molecules are drawn by thick line, and water molecules by thin line.

Fig. 3 Order parameter profile along the alkyl chain of DPPC molecule. Closed square: *sn*-1 chain and closed triangle: *sn*-2 chain at 353 K. Open square: *sn*-1 and open triangle: *sn*-2 chain obtained from NMR at 323 K.

$$S(t, A) \equiv \begin{cases} +1, & \text{for } |A| \geq 2/3\pi : (\text{trans}) \\ -1, & \text{for } |A| \geq 2/3\pi : (\text{gauche}) \end{cases}$$

を導入し、その自己相関関数を計算すれば異性化の時定数が見積もられる⁹⁾。ここでは S は 0 でない平均値を持つため、 $\delta S = S - \langle S \rangle$ の相関関数、つまり $\langle \delta S(t) \delta S(0) \rangle$ で定義する。エステル結合部においても安定な 2 状態が見出され、それらの間の異性化を上記の関数を用いて観測することができる。その結果を Fig. 4 にまとめて示す。位置によって異性化の時定数が大きく異なることがわかる。アルキル鎖の末端では約 20 ps で異性化が起こるが、ヘッドグループのリン酸基における異性化運動は約 800 ps と 40 倍もの時間がかかることがわかる。ヘッドとテールの運動性のコントラストは、ヘッドグループ間やヘッドグループと水との静電相互作用によって生じると考えられる。ヘッドグループのゆっくりした運動に比べるとアルキル鎖は十ピコ秒オーダーでさかんに運動し、アルキル鎖の先端に近づくほどその傾向が強くなる。膜垂直軸方向に沿って電子密度分布をプロットするとリン酸基の位置で密度ピークがありアルキル鎖末端で特異的に密度が下がるという結果も得られており¹³⁾、末端部分の密度はアルカンのものと同程度で運動性も非常に近いことを支持している¹⁰⁾。末端部分の運動性の高さから予測されるように、実際アルキル鎖はある種の振り子運動を示し、その時定数は 1 ナノ秒程度であると計算された⁹⁾。また、アルキル鎖は同程度の時定数で伸縮運動が観測されている。(Fig. 4) さらに重要なことは、このアルキル鎖の伸縮・振り子運動が膜面積の揺らぎとほぼ同期しているという結果が得られたことである⁹⁾。脂質分子重心の膜面への投影に対して 2 次元ボロノイ解析を適用した、ボロノイ多角形の面積を膜面積としたさらに詳しい解析からは、膜面積が体積に比べ相対的に 1 オーダー大きくゆらぎ、そのゆらぎがアルキル鎖の構造に密接に関連し、さらに面積が大きい場合には二面角の異性化も促進されていることが調べられている¹⁷⁾。この膜面積ゆらぎは低分子の膜透過(受動輸送)と密接に関連すると考えられている。これまでに自由エネルギー計算から低分子の膜透過の研究がなされているが¹⁸⁾、ゆらぎという観点での報告は無く、今後の展開が期待される研究分野の一つである。

4 界面電気二重層の分子論

脂質分子が並び、二重層膜を形成することで界面において

電位勾配が形成される。この電位勾配は膜の物理的性質を決定する重要な役割を担っていると同時に、極性を持つ小分子やイオンの膜透過、そして膜中に存在するたんぱく質のコンホメーションにも大きな影響を与えていると考えられる²⁾。そのため、膜の静電的性質や界面の分子論的状態は魅力ある研究対象であり、ここでは界面電気二重層の形成に関する分子論的な描像を中心に紹介する。

脂質二重層膜の膜垂直方向(z 軸)に沿っての膜電位を調べるためには、ポアソン方程式が利用される。

$$\phi(z) - \phi(0) = -\frac{1}{\epsilon_0} \int_0^z dz' \int_0^{z'} dz'' \rho(z'')$$

ここで、 $\phi(z)$ 、 $\rho(z)$ はそれぞれ位置 z における静電ポテンシャル及び電荷密度である。 $z=0$ は、脂質膜に挟まれた水層の中心に設定した。Fig. 5 に、DPPC の計算例を示す。図には脂質分子と水分子による膜電位への寄与を明確にするため、それぞれの電荷について分割して計算した結果も併せてプロットしている。脂質分子は膜内部にマイナス電位を形成する

Fig. 4 Time constants of various motions of a single DPPC molecule; isomerization at dihedrals, wobbling in a cone, and stretching of the alkyl chain.

Fig. 5 Electric potential profile along the bilayer normal. Center of the water lamella is chosen to be at $z=0$.

が、水分子による逆向きの電位によって過度に打ち消されており、全体としては膜内部において約1 Vのプラス電位が形成されていることがわかる。これはカチオンよりもアニオンの方が膜に浸透しやすいことを意味する。このことは脂質二重層膜に対する、疎水性イオンの透過に関する実験事実と一致する²⁾。

界面における電位勾配を詳しく見ると2段階で変化していることがわかる。電位形成の分子構造を明らかにするため、膜垂直方向に沿った各原子の分布を Fig. 6 に示す。第一の電位勾配は脂質分子のエステル基付近に存在し (~ 300 mV)、第二はリン酸基付近から水層にかけてのやや広い範囲にわたって存在する (~ 700 mV) ことがわかる。この2つの勾配の間に挟まれる領域では脂質と水の分極がちょうど釣り合っている(打ち消し合っている)。第一のエステル基付近での電位勾配は脂質の分極のみによって形成されている。すなわち、エステルのC-Oベクトルが膜の外側を向くという配向を取りやすく、これが電位勾配を形成する^{19,20)}。水分子はこの領域まで浸透することが困難であり、エステルの分極を打ち消すのに十分な量でない。第二のリン酸基付近での勾配はリン酸基の酸素と水素結合した水分子によるところが大きい。PCではリン酸基の負の電荷からコリンの正電荷にかけて大きな双極子が存在する。これを打ち消しているのが水の水和であるが、正に帯電したコリンはN原子にメチル基が3つ結合するというかさばった構造をとっているため、コリンへの水和は余り重要でない。このため、ヘッドグループ付近での水の配向はほとんどリン酸基によって決まり、水はリン酸基に双極子を向ける。一方で、水の膜垂直軸に沿っての水分子の存在量は、この領域で大きく変化し、当然の事ながら膜の外側でより多くなる。したがって、水の作る電位勾配は、リン酸基よりも膜の外側において双極子を膜側に向けて配向する水によって主に決められ、これは、リン酸基よりも膜の内側には水がほとんど存在しないため、水自身の双極子によっては打ち消されない。また、この効果はリン酸基とコリンによる電位勾配の生成よりも大きく、膜内部のプラスの電位において形成に寄与している²⁰⁾。Fig. 7にはPC膜系に含まれる双極子の配向を概念的に示す。以上の描像はPCに対してのものであるが、コリンがエタノールアミンに代わったもう一つの代表的なリン脂質であるPEでは様子が異なる。プラスに帯電したアミン上の水素原子は水と強く水素結合する。このとき、水はリン酸基への配向とは逆向きにダイポールを

Fig. 6 Density profiles of polar atoms across the membrane. Center of the water lamella is chosen to be at $z=0$.

向ける。これらの2種の配向がヘッドグループ付近で互いにキャンセルしあうために、ジラウリルホスファチジルエタノールアミン (DLPE) ではリン酸基付近の電位勾配が存在せず、電位勾配がエステル基における1段階でしかないと報告されている¹⁹⁾。

膜が形成する電位勾配は界面付近における水分子の運動に大きな影響を与える。界面付近では水分子の運動が拘束されるばかりでなく異方性が著しくなるという特徴がある。ダイポール軸の回転は膜垂直方向(z 軸)への反転が困難となるため、膜面内(x - y 平面内)での回転が x - z 面や y - z 面内よりも起こりやすく、時定数にして5 psほど短くなる。これはリンの位置から5 Å ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$)程水層側にかけて存在する水分子に特徴的に見られ、それより水層側でも膜側でもこの回転運動の異方性は確認されていない。この付近に存在する水のダイポール軸の回転運動に対する制約は、1分子運動だけでなく集団運動に対しても見られた。脂質分子の瞬間の構造によって形成される双極子モーメントを打ち消す方向に水分子が双極子を向けるという相関が z 軸方向にはあり、系全体としての双極子モーメントは z 方向で常に小さく、そのゆらぎは x , y 方向に比べ1オーダー小さいものとなっている。これは線形応答理論によって誘電率と関係づけられるが、結果として膜面方向に比べ膜垂直方向の誘電率成分は1オーダー小さいことが判明した²⁰⁾。(分子動力学シミュレーションによって誘電率の絶対値を求めることは一般に難しくバルクの水でさえ実験値を再現することは比較的困難であるため、ここでは定性的な議論に留める。)一方、水分子の拡散は水層の中心においても異方性を示す。すなわち、 z 軸方向への拡散は x , y 方向に比べ抑制されている。界面に近づくにつれて運動性はどんどん落ちていく傾向が並進、回転運動に共通して見られる。並進拡散定数は飽和の水量における水層の中心部ではバルクの水と同程度であるのに対して、界面層、特にリン酸基よりも膜内部に存在する水分子の拡散定数は、バルクに比べ5分の1程度にまで低下している。この領域では並進運動の異方性が見られず、どの方向にも運動し難い状況であることがわかっている。これら界面層に拘束された水分子がこの領域から脱出するまでの時定数も見積もられており約10 ps程度という結果を得ている。脂質分子の運動性に比べると (Fig. 4 参照) この時定数は随分短く、ヘッドグループのリン

Fig. 7 A schematic picture of the direction of dipoles at the interface. Signs and arrows in the figure represent the signs of partial charge on the atom and the dipole moments, respectively.

酸基に水素結合した水分子が脂質と同期して動いているわけではなく、ヘッドグループが一度向きを変える間に水は何度も入れ替わっている。界面領域に水分子が浸透する量は脂質分子のコンフォメーションによって支配されており、膜面積のゆらぎと界面層での水の数密度が同期していることも判明している⁹⁾。

5 おわりに

分子動力学シミュレーションによる脂質二重層膜の研究はますます盛んとなり、今では対象をタンパク質やコレステロールとの混合系、または麻酔、塩などの添加系にまで広げられている。しかしながら、単純な脂質二重層膜系においてすら、シミュレーションからすべての実験値、現象を定量的に再現することは依然として困難であり、特にポテンシャルに関しては改良の余地が残されている。近年、膜系に対するポテンシャルの開発も行われ実験値の再現性が向上しているが、この努力は今後も続けられねばならないだろう。一方、シミュレーションで扱うことのできる空間・時間スケールの限界が生体膜系においては小さすぎることがしばしばある。特に生命現象の多くはナノ秒よりもずっと長い時定数で起きる。たとえば、脂質分子の側方拡散などの物理化学的現象は、これまで通りの計算手法を用いて近い将来観測することが可能であると思われるが、生体系においては、どれだけコンピュータが高速化しても従来の方法では計算不可能な現象の方が圧倒的に多く、方法論の発展がぜひとも望まれる。将来の展望を見据えると、時定数の極端に長い現象を分子レベルで捉える手法の開発は不可欠であり、その一つとしてはより粗視化したモデルとの融合という方向があろう。分子レベルの情報を落とすことなく、いかに長時間の現象を捉えることができるかが今後の課題である。

文 献

- 1) K. M. Merz, Jr. and B. Roux eds. *Biological membrane: A Molecular Perspective from Computation and Experiment*. Birkhäuser, Boston (1996).
- 2) R. B. Gennis, *Biomembranes, Molecular Structure and Function*, Springer-Verlag, New York (1989).
- 3) R. Goetz, G. Gompper, and R. Lipowsky, *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 221 (1999); R. Goetz and R. Lipowsky, *J. Chem. Phys.*, **108**, 7397 (1998).
- 4) R. W. Pastor, *Curr. Opin. Struct. Biol.*, **4**, 486 (1994).
- 5) D. J. Tobias, K. Tu, and M. L. Klein, *Curr. Opin. Colloid Interf. Sci.*, **2**, 15 (1997).

- 6) K. M. Merz, Jr., *Curr. Opin. Struct. Biol.*, **7**, 511 (1997).
- 7) M. Parrinello and A. Rahman, *Phys. Rev. Lett.*, **A42**, 5045 (1980); S. Nosé and M. L. Klein, *Mol. Phys.*, **50**, 1055 (1983).
- 8) W. Shinoda, T. Fukada, S. Okazaki, and I. Okada, *Chem. Phys. Lett.*, **232**, 308 (1995).
- 9) W. Shinoda, N. Namiki, and S. Okazaki, *J. Chem. Phys.*, **106**, 5731 (1997).
- 10) 岡崎 進, 表面, **34**, 205 (1996).
- 11) S. W. Chiu, M. Clark, V. Balaji, S. Subramaniam, H. L. Scott, and E. Jakobsson, *Biophys. J.*, **69**, 1230 (1995).
- 12) S. E. Feller and R. W. Pastor, *Biophys. J.*, **71**, 1350 (1996); S. E. Feller and R. W. Pastor, *J. Chem. Phys.*, **111**, 1281 (1999).
- 13) G. Ceve and D. Marsh, *Phospholipid Bilayers*, Wiley-Interscience, New York (1987).
- 14) R. Mendelsohn, M. A. Davies, J. W. Brauner, H. F. Schuster, and R. A. Dluhy, *Biochemistry*, **28**, 8934 (1989); D. A. Pink, T. J. Green, and D. Chapman, *Biochemistry*, **19**, 349 (1980); J. Seelig and A. Seelig, *Q. Rev. Biophys.*, **13**, 19 (1980).
- 15) E. Sackmann, *Handbook of Biological Physics*, Vol. 1A, *Structure and Dynamics of Membranes*. (Eds. R. Lipowsky and E. Sackmann), Elsevier, Amsterdam, p.213 (1995).
- 16) R. M. Venable, Y. Zhang, B. J. Hardy, and R. W. Pastor, *Science*, **262**, 223 (1993).
- 17) W. Shinoda and S. Okazaki, *J. Chem. Phys.*, **109**, 1517 (1998).
- 18) S. J. Marrink and H. J. C. Berendsen, *J. Phys. Chem.*, **98**, 4155 (1994); *J. Phys. Chem.*, **100**, 16729 (1996).
- 19) F. Zhou and K. Schulten, *J. Phys. Chem.*, **99**, 2194 (1995).
- 20) W. Shinoda, M. Shimizu, and S. Okazaki, *J. Phys. Chem., B*, **102**, 6647 (1998).

●著者プロフィール

氏名：篠田 渉 Wataru SHINODA
所属：東京工業大学大学院総合理工学研究科
電子化学専攻 (〒226-8502 横浜市緑
区長津田町 4259)
(平成 10 年 4 月より三菱化学株式会社
横浜総合研究所計算科学研究所 (〒227
-8502 横浜市青葉区鴨志田町 1000))

役職：学生 (博士課程)
趣味：音楽鑑賞, ギター

氏名：岡崎 進 Susumu OKAZAKI
所属：東京工業大学大学院総合理工学研究科
物質電子化学専攻 (〒226-8502 横浜
市緑区長津田町 4259)

役職：助教授
趣味：山歩き, 昼寝