

---

## 学会見聞記

---

### 第 8 回 ISSSSI に出席して

謝名堂 昌信

第 8 回、溶質-溶質-溶媒相互作用に関する国際シンポジウム (ISSSSI) は、約300人の参加のもとに 8 月 9 日から 4 日間、西ドイツの古都レーゲンスブルグで開催された。レーゲンスブルグは東バイエルン地方にある人口130,000人の小都市で、かつて中世のヨーロッパにおける経済、学術、政治の中心であったといわれるだけに、歴史的重量感に充ちた静かな古い町である。シンポジウムは、その郊外にある比較的新しいレーゲンスブルグ大学 (設立1962年、学生数11,000人) の化学/薬学部で行なわれた。

シンポジウムは内容によって次の 6 つに区分されて行なわれた。

Section 1. Theories of liquids, solutions and melts

Section 2. Thermodynamic and transport properties of liquid system.

Section 3. Spectroscopic, dielectric and kinetic investigations on solute-solute and solute-solvent interactions

Section 4. Computer assisted methods in solution chemistry; data bases

Section 5. Modern technologies based on electrolyte solutions

Section 6. The physical chemistry of small carbohydrates

筆者が発表、聴講、討論に加わったのは、Section 6 で、この Section は特に The Royal Society of Chemistry, Faraday Division, Industrial Chemistry Group のスポンサーシップの下で行なわれたシンポジウムで、主として Cambridge 大の Franks 教授によって企画されたものであった。このセクションを中心にシンポジウムの概要を記したいと思う。それぞれ違う立場から14人の演者による溶液化学についての plenary lecture があり、その中には東京工業大学の

京都女子大学食物学科栄養学第 3 研究室

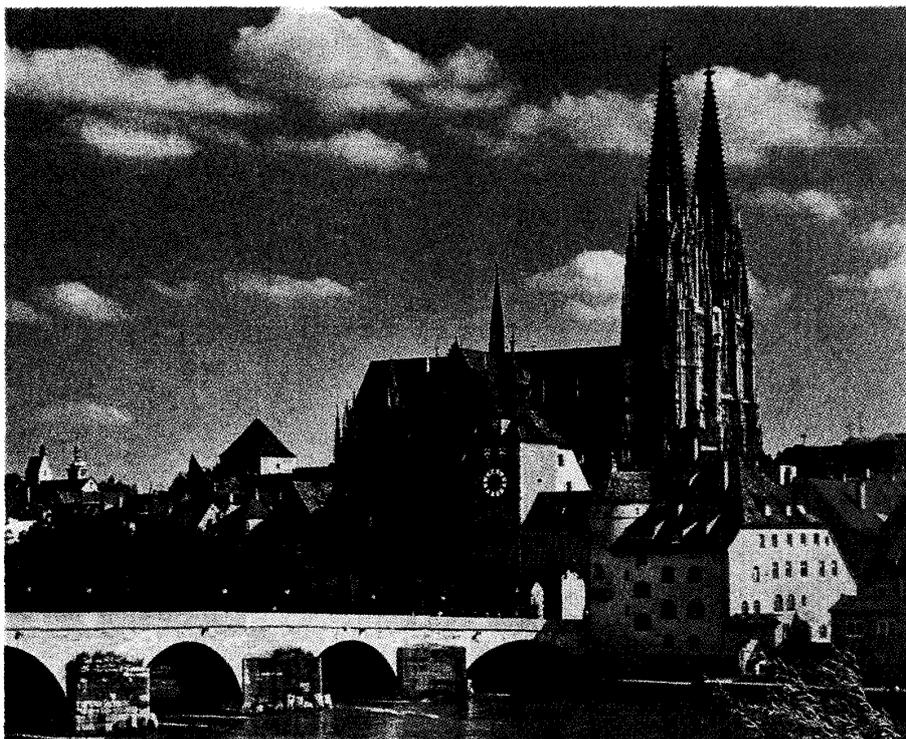
瀧仁志教授の非水溶液中における金属イオンの溶媒和に関する明快な講演も含まれていた。先ず糖の物理化学部門では、F. Franks (Cambridge 大) の低分子糖水溶液の平衡系に関する物理化学と題する講演の中で、いわゆる Hard sphere model の限界、コンピュータ・シミュレーションの有効性と限界が指摘される一方、Polydroxy compounds (PHCs) の溶液中における物理化学的性質は、溶媒和に大きく依存することが強調された。例えば、糖水溶液の過剰熱力学パラメータに関する宮嶋氏 (京大・薬) のデータを引用して、エンタルピー/エントロピー・コンペンゼーションによって、水溶液中の糖がみかけ上理想的なふるまいをすることなどを指摘し、PHCs 水溶液の性質が複雑であることが強調された。

さて、Section 6 (糖溶液の物理化学) は23の講演 (20分) と 8 つのポスター発表からなり、その内容は主として、 $^1\text{Hnmr}$  スペクトルや Molecular dynamics simulation による水溶液中の糖のコンホメーションに関する研究、糖溶液の過剰熱力学関数の測定、糖の CH 基に基づく疎水性に関する研究、少し変わったところで糖の甘味の化学などであった。筆者がとりわけ関心をもったのは、R. L. Kay and J. Dadok (Carnegie-Mellon 大)、F. Franks (Cambridge 大)、K. Watson (Waterloo 大) の共同研究による  $\text{D}_2\text{O}$  及び Pyridine- $d_5$  中におけるリビトール、キシリトールおよびアラビノトールの  $^1\text{Hnmr}$  スペクトルについての報告であった。要するに、彼らの結論は、これらの PHCs の結晶状態でのコンホメーションと溶液中でのそれとは全くちがうものであるということである。この結論は、結晶状態でのコンホメーションが溶液中においても概ね維持されるとするこれまでの多くの研究を根底からゆさぶるものである。事実、筆者とともにこのセクションに加わった宮嶋氏 (京大・薬) の扁平型分子 (単糖、肝汁酸) の疎水性インデックスに関する研究報告、並びに筆者自身の糖 (単糖、デオキシ糖、メチル配糖体、

グルコ2糖類)の疎水性に関する報告も、基本的には結晶の原子座標に基づいて計算された糖のCH基の占める表面積比(Index A: 宮嶋ら)を中心に展開されたものである。糖の疎水的挙動がCH基に基づくことは間違いないとしても、もしKay教授らの結論が全面的に正しいとすれば、Index Aはその定量性を失うことになる。しかし、溶液中から糖が結晶化する転移過程においては、結晶と同じか、それに近いコンホメーションをとることは確実だと思われるので、その旨の意見を述べたところ、この点については彼らも考える余地があるとの見解を示した。いま一つ筆者の興味を引いたのは、J. R. Grigera (La Plata 大)による水溶液中のマンニトール及びソルビトールについてのMolecular dynamics simulationの結果で、それによるとマンニトールに水和した水分子のライフ・タイム(水和のライフ・タイム)はソルビトールのそれのほぼ2倍であるということである。両者ともいわゆる、Structure breakerであり、前者よりも後の方がその効果大きいことはこれまでも示唆されていることであるが、しかし構造的に極めて類似したこれら2つの分子の水に対する挙動の差にしては予想外に大きいと思われるのである。同様なことは単糖類間にも予想されることであり、いわゆる specific hydration とか分子内の水和殻相互作用と直接関連することであろうし、現在、筆者が問題にしている糖の疎水性を考え

る者で大変参考になったことである。

糖の甘味と構造の関係については不明な点が多いが、G. G. Birch & S. Shamil (Reading 大)らによると、甘さの強度や持続性は糖のみかけのモル容積に依存するとのことである。ポリヒドロキシ化合物の甘さは、その $\alpha$ -グリコール基と甘味リセプターとの水素結合によってもたらされると考えられているが、Birch教授らによれば、アルド六炭糖の場合はC-3とC-4のOH基が関与するとのことである。彼らは更に、糖のリセプターへの接近・結合は糖の水和度(水素結合形成力と水和分子の大きさ)に依存し、従ってみかけのモル容積に関係するというのである。考え方としては面白いが、その議論展開にはかなりの飛躍があり、厳しい批判もあった。彼らは更に、アルド六炭糖の精密なモル容積のデータに基づいて、ピラノース環のO原子、C-1、C-2の周辺は他の部分に比較して親水性が低いこと、そしてそれはピラノース環のO原子がエーテルO原子と同程度の低い親水性を持つことに起因すると結論した。この考え方によれば、 $\beta$ -D-グルコースなどのSpecific hydration modelにも当然、修正が加えられなければならないことになる。O原子、C-1、C-2の周辺の親水性水和はかなりルーズであるということになるからである。この点に関しても批判的な意見があったが、筆者は極めて興味深い考え方だと思っている。その他にも糖溶液の物理化学に関する多くの



レーゲンスブルグ市

研究報告がなされたが、一貫して議論されたことは溶媒和の問題であり、とりわけ水和度とか水和数の定義が不明確であるために議論がどうどうめぐりになることがしばしばあった。糖の水溶液の物理化学的性質が糖の水和に大きく依存することは明らかであるが、水和を一つの定量的なパラメータとしてとれないところに問題があることを痛感した。

この学会でもう一つ強く感じたことは、分子力学に関するコンピュータ・シミュレーションが予想以上に流行しているということである。前述のように、Franks 教授がその手法の有効性と限界について詳しい解説を行ったのであるが、その点については私自身も強い関心を持っている。コンピュータ・シミュレーションが与えられた問題に対する理解を深め、場合によっては正確な予測を可能にすることも事実であるが、しかしそれがいわば架空の計算機実験である以上、その結果は最終的には正確な実験データによるあらゆる方向からのチェックを必要とする。私が言いたいのは、地道な実験測定よりもコンピュータ・シミュレーションの方が優位になり、いずれ混乱をきたす気配があるということである。事実、豊富な実験データを基礎にした研究報告は少なかったように思われるのである。

このシンポジウムに参加した300人中約200人は西独外からの参加者（日本から8人）であったが、その大部分の人々が安い宿泊費で大学の学生寮を利用させてもらった。レーゲンスブルグ大学の J. Barthel 教授及び G. Schmeer 教授を中心とした主催者側のこうした配慮は非常に有難いことであった。大学が効外にあるので、夕食をとるのに多少の不便は感じたが、朝と昼は大学の食堂で安くておいしい食事がとれたことも大変有難いことであった。ドイツのパンは極めて固く、のみこむまでにかかなり長い間かまなければならなかったが、小さい時からこういう固いものをかみ続けると

きつと歯が丈夫になるにちがいないなどと思った。学会の合間に町に出て、ドナウ川沿いのビヤガーデンでフランクフルトを食べながらおいしいビールを飲んだことも楽しかったことの一つである。学会終了後の翌日に企画された約14時間の長い Tour にもたくさんの人が参加した。先ずバスでレーゲンスブルグの東南に位置するパソウ (Passau) という町まで行き、そこからチャーターされた大きなフェリーに乗ってドナウ川を下り、オーストリア国境まで行った。ボートから見える周辺の景色は実に素晴らしく印象的であった。レーゲンスブルグに帰りついたのは午後11時前で、参加者はそれぞれが宿泊している所でさようならを言いながらバスを降りていき、第8回 ISSSSI は文字通り幕を閉じた。

さて、この国際シンポジウムは、来年 (1988年) はスウェーデンのルンドで開かれることになっているが、その時は ISSSSI ではなく、International Conference on Solution Chemistry (ICSC) の名称の下で行なわれることになっている。1972年に発足したこの ISSSSI はこれまで非水溶液より水溶液の化学に片寄り過ぎていたと言われる。そこで、溶液化学の分野をより広くカバーするために、International Conference on Non-Aqueous Solutions (ICNAS) と合体し、ICSC の名の下にその活動を継続するとのことである。従って、来年 (1988年) スウェーデンで開催される ICSC は今回の ISSSSI よりも組織的にも参加者数においてもかなりスケールが大きくなるものと予想される。

筆者にとってこの国際シンポジウムへの出席は今回が初めてであり、講演を聞きながら自分の力不足を自覚する反面、現在筆者が興味を持っている「疎水性相互作用」の問題を考えていく上で大変参考になることを学びとったように思う。