

# 大学院教育支援機構（DoGS）海外渡航助成金 報告書

## Outcome report

計画名 Plan	BSC への研究留学および ACS Fall での研究発表
氏名 Name	栗田 太一
研究科・専攻・学年 Graduate school/Division/Year level	工学研究科 材料化学専攻 博士後期課程 3年
渡航国 Country	スペイン、アメリカ
渡航日程 Travel schedule	2024年 6月 9日 ~ 2024年 8月 24日

- ページ数に制限はありません。No limits on the number of pages
- 写真や図なども組み込んでいただいて結構です。You can include pictures or illustrations.
- 各項目について具体的に記述してください。Please fill in each item specifically.
- 日本語または英語で記載ください。Please use Japanese or English.

### 渡航計画の概要 Outline of the travel plan

本渡航計画は2つの計画からなる

1. Barcelona supercomputing center (BSC), Electron Atomic Protein Modeling (EAPM) group にて、Prof. Victor Guallar の指導のもとで、MD シミュレーションを用いたペプチドからなるロタキサンの分子間相互作用解明に関する研究を行う。(6/9-8/17)
2. アメリカ・デンバーにて開催される国際学会 (ACS Fall 2024)において、自身の研究テーマである「ペプチドからなるロタキサンの合成」に関して口頭発表する。(8/18-8/24)

### 成果 Outcome

本渡航は、申請者にとって初めての海外での研究活動であり、またシミュレーションという普段の研究分野からは少し離れた分野に関する研究テーマであったが、Victor 教授をはじめ、EAPM のメンバー皆が手厚くサポートしてくださったおかげで充実した研究生活を送ることができた。研究成果に関しては、未発表のため詳細については割愛するが、普段とは異なる視点でアプローチすることができたため、自身の研究をさらに深化させることができた。また、研究室生活も日本とは全く異なる点をいくつも痛感した。具体的には、ランチはメンバー全員でとる、17 時過ぎになるとメンバー全員が帰る、バケーションは必ず取る、卒業のタイミングは成果に合わせて皆異なる時期である、就職活動は卒業してから始めるなどである。このような多様な価値観に触れることができ、自身のライフプランを考え直す良いきっかけになった。

ACS Fall 2024 での研究発表では、質疑応答を通じて、さまざまな研究者と議論することができ、多様な視点から自身の研究を見直すことができた。加えて、数多くの口頭・ポスター発表を聴講し、最新のトピックについて情報収集を行った。また、バイオ高分子の分野における権威ある雑誌の一つである Biomacromolecules 誌の 25th Anniversary Reception や学会主催の交流会にも参加し、同じ分野で活躍している教授陣や editor、同世代の博士学生らと広く交流することができた。

### 今後の展望 Prospects for the future

Victor 教授のもとで取り組んだテーマに関しては、論文化に向けて帰国後も研究を継続する予定である。また、本渡航で出会った研究者とは SNS 等で引き続き連絡を取り合っていく予定である。最後になりましたが、ご支援をいただきました、京都大学大学院教育支援機構 (DoGS) 様に感謝を申し上げます。



図 1. BSC のスーパーコンピュータークラスター



図 2. ACS Fall の会場風景