

課題名 (タイトル) : 超高速ラマン分光による生体内分子反応の研究

利用者氏名 : 藤澤 知績

理研での所属研究室名 : 本所 田原分子分光研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

生体内で起こる種々の化学反応によって生命活動は維持されている。たとえば、酵素反応における“基質分子”と“酵素の活性部位”の結合が「鍵と鍵穴」で比喻されるように、生体内反応ではタンパク質構造と反応分子の構造とが密接に関連しあう。我々は分子構造情報に基づいた生体内反応の理解を目指しており、そのために用いている手法が、反応分子の構造を 실시간で追跡できる時間分解振動ラマン分光法である。しかし、振動ラマンスペクトルの解釈には、実験的方法だけでなく、量子化学計算が役立つ場合が多い。量子化学計算を用いた振動スペクトルデータの考察をするために、大型計算機を簡易利用した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

現在、フラビン系タンパク質の光化学反応の研究を進めており、GaussView および Gaussian03 を利用してフラビンの振動状態に対して密度汎関数計算を行った。特にこれまで観測されてこなかった低振動領域について測定したため、計算結果に基づいた低振動バンドの帰属を試みた。

3. 結果

現段階では、計算結果から低振動バンドの帰属を十分にはできておらず、計算レベルを修正して実験データとの比較を試みる。また今後、タンパク質環境でのフラビンの構造変化を考慮した計算も試みることで考察を進める。