

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

所属 : 和光研究所 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

生物は、光や熱、あるいは化学物質といった様々な外部刺激にさらされて活動しており、外部刺激に対する応答を最初に担うのは生体の受容タンパク質である。特に光を感知する光受容タンパク質は、分子分光学によって詳細な研究ができる対象である。

タンパク質において、その構造は極めて重要となる。なぜなら、タンパク質の構造は、生命活動の素過程であるタンパク質内の分子の反応機構やタンパク質間コミュニケーションのメカニズムに対して具体的な示唆を与えるからである。我々は、生体の光受容タンパク質が機能する仕組みについて、動的な構造情報を追跡できる時間分解振動ラマン分光法を用いて研究を進めている。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。そのため量子化学計算を用いて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

研究対象はフラビン色素を利用した生体の青色光センサーであり、特に光を受けた初期の光化学反応の分光研究を進めている。我々が実験で得たフラビンの振動スペクトルの振動バンドを詳細に帰属し解釈するために、Gaussian09 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。

3. 結果

フラビン色素の基底状態について、計算から得られた振動スペクトルと実験結果を比較したところ、両者の一致が悪く、計算に基づいた詳細な振動バンドの帰

属はできなかった。

4. 今後の計画・展望

現在は他のタンパク質の研究も進めているため、今後は対象分子をフラビン色素に限らず、振動計算を利用して実験研究の一助としたい。