

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 : 本所 田原分子分光研究室

<p>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</p> <p>生体内で働くタンパク質は生命現象の担い手であり、タンパク質を反応場とした化学反応によって生命活動は維持される。本研究ではバクテリアの青色光センサーの一つである BLUF タンパク質と緑色蛍光タンパク質 GFP を対象として、その光反応のメカニズムを研究した。研究に用いた手法は反応中の分子の振動スペクトルを実時間で追跡する超高速時間分解ラマン分光法である。実験から得られる振動ラマンスペクトルの振動バンドの帰属や解釈には量子化学計算による振動スペクトル予測が有効になる場合が多い。そのため、大型計算機での量子化学計算も利用して研究を進めてきた。</p>	<p>3. 結果</p> <p>GFP 発色団のヒドロキシベンゼン部位とイミダゾリノン部位が面内で近づいたり離れたりする歪み運動が約 <math>100\text{ cm}^{-1}</math> の振動数を持つことが密度汎関数計算 (計算レベル : B3LYP/6-311G+(d, p)) によって予測された。計算では発色団まわりタンパク質を含めずに行ったが、実際のタンパク質内では発色団近傍のアミノ酸残基の低振動運動が存在するため、実験で観測した約 <math>100\text{ cm}^{-1}</math> の低振動モードは周辺アミノ酸残基と結合した発色団のゆがみ運動の可能性が高いと考えた。</p>
<p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>本年度、計算の対象としたのは緑色蛍光タンパク質 GFP の発色団の振動スペクトルである。GFP の発色団 (<i>p</i>-ヒドロキシベンジリデンイミダゾリノン) の振動スペクトルの高振動領域については報告された文献等と照らし合わせることで振動バンドの帰属をすることができた。しかし、我々は帰属が不明な <math>100\text{ cm}^{-1}</math> 程度の低振動モードも観測したため、Gaussian09 を利用して GFP の発色団の密度汎関数計算を行うことで、その振動バンドの帰属を試みた。</p>	<p>4. 今後の計画・展望</p> <p>今後は GFP の発色団近傍のアミノ酸残基を変えた GFP 変異体を用いて実験を進める予定である。実験結果の解釈のために、GFP 発色団と特定の周辺アミノ酸残基との水素結合を取り入れた計算を試みる。</p>