

「物質現象の解明と応用に資する新しい計測・分析基盤技術」
平成16年度採択研究代表者

下山 雄平

(北海道教育大学大学院教育学研究科 教授)
(現、室蘭工業大学教育研究支援機構 教授)

「多量子遷移ESRによる巨大分子の構造解析」

1. 研究実施の概要

本研究では、市販装置では不可能な、構造解析専用の多量子遷移ESRを開発する。パルス幅の時間スケールを市販機器の1/10（約数ナノ秒）に短縮し、多量子状態を一挙に照射励起する事により双極子相互作用の強度を正確に測定できる多量子遷移ESRの開発を目指す。また、多量子遷移ESRを用いて、ラベル間の距離計測によって巨大分子内の無秩序固体又は溶液状態の三次元構造解析を行う。

多量子遷移ESR機器の開発では、新規のマイクロ波回路と空洞共振器の設計と理論計算および組み立ての順序で計画している。本年度は、グリシン (Y. Grishin) 教授（ロシアアカデミー化学反応研究所）を招聘し、北海道教育大学下山研究グループ、東北大学大庭研究グループ、山形大学小野研究グループおよび日本電子（株）（JEOL）グループで装置回路設計の検討を行い、マイクロ波回路は数ナノ秒のパルスの送受信ができるものと方針を決定した。これと並行して、グリシン教授の指導により、パルス・マイクロ波ESR装置のチャンピオンデータ（ナノスケールの分子間距離を測定により確認）を観測した。H17年度は、下山研究グループが開発したバイラジカル試料を用いて、設計基本方針の実証試験を行う。また、大庭研究グループは、多量子遷移信号を測定するためのプラットフォーム（電磁石+制御装置、分光器）を導入・設置し、K-バンド・パルスESRの開発を始めた。

共振器の開発では、本年度は、小野研究グループ、下山研究グループおよびJEOLグループで、誘電共振器、ループギャップ共振器、空洞共振器を並行して開発する基本方針を決定した。H17年度は、共振器の設計と組立を進める。

ESR応用研究では、機器開発研究の標準試料のためにバイラジカル化合物の設計・合成を行った。バイラジカル化合物の設計は、ハステッド (E. J. Hustedt) 教授（米国バンダービルト大学）を招聘して行った。設計理論は第1回国際ワークショップ（H17. 1. 27～29）にてレクチャーを受け、その後、実際の合成技術について指導をハステッド教授から受けた。また、バイラジカル化合物の標準試料をハステッド教授から譲り受け分析と合成を行った。H17年度は、引き続きこの分子の数理解析を実施する。

また、ESR応用研究では、北海道大学・稲波助教授から狂牛病の病原であるプリオン・

タンパク質の精製の指導を受け、H16年12月から共同研究を開始した。さらに、生体系化合物への連続波 (CW) -ESRの応用と新規パルスESRへの応用の可能性を検討すべく、大阪大学荒田研究グループおよび理化学研究所山崎研究グループにおいてESR計測をNMR計測と比較しながら予備実験を行った。ESRを利用したラジカル検知法の開発と新規パルスESRへの応用の可能性の検討を併せて行った。ラジカル検知法についてはgamma-rayおよびX-ray照射により誘起されるラジカルの検出・同定を行った。H17年度は、CW-ESRのみならず世界に先駆けて新規パルスESRによるラジカル測定を実施する。

2. 研究実施体制

下山研究グループ

- ①研究分担グループ長：下山 雄平（北海道教育大学大学院教育学研究科*1、教授）
- ②研究項目：①Kuバンド多量子遷移(MQC)電子スピン共鳴(ESR)測定に関する基礎研究と装置開発、②国際共同研究の立案とロシア科学アカデミー化学反応研究所との提携を統括する。

*1 H17.4.1より、室蘭工業大学教育研究等支援機構 教授に転任

大庭研究グループ

- ①研究分担グループ長：大庭 裕範（東北大学多元物質科学研究所、助教授）
- ②研究項目：マイクロ波回路の機器開発

小野研究グループ

- ①研究分担グループ長：小野 光弘（山形大学、名誉教授）
- ②研究項目：空洞共振器の設計

荒田研究グループ

- ①研究分担グループ長：荒田 敏昭（大阪大学大学院理学研究科、助教授）
- ②研究項目：バイラベルによる計測手法の開発

山崎研究グループ

- ①研究分担グループ長：山崎 俊夫（理化学研究所横浜研究所、チームリーダー）
- ②研究項目：ESRとNMRデータの比較検討

3. 主な研究成果の発表（論文発表および特許出願）

(1) 論文（原著論文）発表

- S. Chatani, M. Nakamura, H. Akahane, N. Kohyama, M. Taki, T. Arata and Y. Yamamoto: "Synthesis of C2-chiral bifunctionalised spin labels and their application to troponin C", Chem. Commun., (14), 1880-1882 (2005)

(2) 特許出願

H16年度特許出願件数：3件（CREST研究期間累積件数：3件）