

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
年次報告書(探索研究)

H30 年度 研究開発年次報告書

平成30年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：佐藤 久子]

[愛媛大学大学院理工学研究科・教授]

[研究開発課題名：多次元赤外円二色性分光法の開発]

実施期間：平成30年11月15日～平成31年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1) 愛媛大グループ(愛媛大学)

- ① 研究開発代表者: 佐藤 久子 (愛媛大学大学院理工学研究科、教授)
- ② 研究項目
 - ・多次元 VCD の測定法の開発
 - ・VCD 解析アルゴリズム

(2) JASCO グループ(日本分光株式会社)

- ① 主たる共同研究者: 小勝負 純 (日本分光株式会社 IR/Raman 技術部、部長)
- ② 研究項目
 - ・顕微 VCD 装置の試作
 - ・顕微 VCD 装置の特性評価

(3) 横浜国大グループ(横浜国立大学)

- ① 主たる共同研究者: 川村 出 (横浜国立大学大学院工学研究院、准教授)
- ② 研究項目
 - ・ペプチド合成の実験
 - ・ペプチドの特性評価、分子動力学シミュレーション

(4) 北里大グループ(北里大学)

- ① 主たる共同研究者: 吉田 純 (北里大学理学部化学科、講師)
- ② 研究項目
 - ・顕微 VCD のための液晶性超分子の合成

§2. 研究開発実施の概要

本研究では顕微 VCD/LD(直線偏光測定可能な多次元赤外円二色性分光)装置を開発し、生体中のタンパク質会合体に適用する。得られた二次元 VCD パターンの解析から、高次キラール構造を明らかにし、会合体が生体中において示す生理活性の特徴(正常、異常等)と構造との相関およびその成因を解明する。本年度はタンパク質会合体の解析基礎データを得ることを目的に、種々の L-および D-アミノ酸配列を有する一連のフェニルアラニントリペプチド(L-Phe と D-Phe の組み合わせ全 8 種類)を人工合成した。このトリペプチドはフェニル基間の疎水性相互作用に基づく自己組織化によりフィブリール状会合体を形成する。全 8 種類のトリペプチド(LLL, DDD, LDL, DLD, LLD, DDL, LDD, DLL)について、本研究グループで開発した VCD/LD 装置により VCD 測定を行った。安定なベースラインが保持され、無補正の生データのままで光学対掌体の関係にある試料間での鏡像関係(符号の逆転)を得ることができ

た。第一原理計算に基づいて構造予測と理論 VCD スペクトル算出した。計算結果との比較から実験的に得られたスペクトルのピーク帰属を行った。特に、L-Phe-L-Phe-D-Phe(対掌体 D-Phe-D-Phe-L-Phe)配列のトリペプチドに対して、固体 NMR スペクトルの結果も合わせて検討した結果、分子内および分子間相互作用と π - π スタッキングによってガンマターン構造を示すことがわかった。自己組織化ペプチドにおいてガンマターン構造が見出された初めての例である。特定の位置のアミノ酸残基が L 体から D 体へ変換することによってペプチド中の高次構造が顕著に変わることが明らかにされた。本研究により、固体 VCD/LD 法の高次構造解析への有用性を示すことができた。

1) Self-assembly of tripeptides into γ -turn nanostructures

Yumi Ozawa, Hisako Sato, Yohei, Kawano, Nana Yamaki, Yuichiro Izato, Atsumi Miyake, Akira Naito, Izuru Kawamura*

Phys. Chem. Chem. Phys. (communication) Advance Article 2019, 10.1039/C9CP00233B