

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)

令和元年度 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 31 年 4 月 1 日～令和 2 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、生体中に見られるタンパク質会合体の不斉構造の解明のために多次元 VCD 測定装置を製作し、それを用いて二次元 VCD パターン(横軸が波数;縦軸が位置座標)を得ることを目的としている。本年度は、高濃度試料の迅速測定のために量子カスケードレーザー(QCL)を光源にした VCD 装置を製作した(MDVCD-MIRAI-2020 と命名)。装置製作は日本分光株式会社開発グループを中心に行った。現在までのところ 1500-1740 cm^{-1} の波長範囲における高速測定(0.5 cm^{-1} 間隔を 1 秒で測定)が可能となった。特に、これまで測定のできなかった高吸収試料(吸光度 4 程度)に対しても良好なスペクトルを得ることができた。これにより、水試料中のバイオ物質(ペプチド等)への適用の道が拓けた。並行して、横浜国立大グループと共同で固体 VCD/LD 法による短鎖ペプチドの VCD スペクトルのデータベース化を行った。蓄積した情報をもとに、医薬物質をインターカレートしたドラッグデリバリー系への応用が期待されている無機物質として、層状複水酸化物(LDH)に着目した。LDH は 2 価と 3 価の金属イオンが水酸化物イオンによって連結された層からなり、陰イオン交換性や触媒能が注目されている材料である。今回、層間にフェニルアラニン分子(Phe)を吸着(インターカレート)させ、その構造を固体 VCD スペクトルから求めた。1200-1800 cm^{-1} の範囲で、吸着した Phe に帰属される明確な VCD シグナル(L 体・D 体で反転を示す)を得た。第1原理計算によるシミュレーションによる解析の結果、隣り合ったフェニル基の π - π スタッキングによるアンチパラレル構造に到達した。

- 1) H. Sato, K. Takimoto, I. Kawamura and S. Aisawa, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 2019, **92**, 1779.
(Selected Paper に採択)
- 2) H. Sato, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (perspective), 2020, DOI: 10.1039/D0CP00713G
- 3) I. Kawamura and. H. Sato, *Anal. Biochem.*, 2019, **580**, 14.