



公募研究の申請が始まりました。

平成 21 年度科学研究費補助金「新学術領域研究（研究領域提案型）」（公募研究）の公募が始まりました。本研究領域では、300 万円以内の研究費の研究課題を 30 件程度採択する予定です。応募締め切りは平成 21 年 3 月 6 日です。多くのよい研究課題がこの新学術領域“揺らぎと生体機能”に提案されるように皆様の御協力をお願いいたします。公募の詳細は、文部科学省のホームページ

http://www.mext.go.jp/a_menu/shinkou/hojyo/1217970.htm

を参照してください。

研究領域名：揺らぎが機能を決める生命分子の科学

領域略称名：揺らぎと生体機能

領域番号：2006

設定期間：平成 20 年度～平成 24 年度

領域代表者：寺嶋 正秀

所属機関：京都大学理学研究科

生体分子は、絶え間ない大きな熱揺らぎの中で機能を発揮している。入出力レベルも熱エネルギー程度である生体分子が、強い熱揺らぎの中でなぜ効率的に選択的に機能を発揮できるのか？そこに、静的な構造情報だけではわからない生体機能の本質があり、こうした研究は既存の分野では対応できない今後の生命分子科学の重要な分野となるであろう。

本領域では、A01：揺らぎ検出（構造やエネルギーなどのさまざまな揺らぎ検出手法の開発と、それを用いた生体分子の機能とのかかわりを明らかにする）、A02：揺らぎ制御（アミノ酸置換や欠損、挿入などの変異蛋白質を駆使して、揺らぎを制御する観点からの研究を推進する）、A03：揺らぎと機能（DNA・蛋白質・膜など生体分子全般にわたり、機能に直結する揺らぎを検出し、機能との関連に重点をおいて明らかにする）の観点から、物理、化学、薬学、医科学等多分野の力量ある研究者が結集し、生体分子の揺らぎの統一的研究を通してそれらの分野融合を行う。これにより、これまで統一的に考えられることの少なかった、揺らぎの本質や機構を物理化学的に明らかにし、「揺らぎと生

命分子科学」と言う新しい先端融合領域を創生することを目指す。

このため、次の研究項目について、「計画研究」により重点的に研究を推進するとともに、これらに関連する分子科学、計測科学、生命科学などの分野の実験及び理論研究者で、2 年間の研究を公募する。1 年間の研究は応募の対象としない。研究分担者は置くことはできない。特に、生体分子全般にわたる対象や新しい発想の揺らぎ計測手法・理論により、「揺らぎと生体機能」に挑戦する研究者を歓迎する。また、異なる分野の研究者間の共同研究を推奨する。公募研究の単年度当たりの応募額は、300 万円を上限とする。採択目安件数は、各項目それぞれ 10 件程度、計 30 件程度を予定している。

なお、研究内容の詳細については、領域ホームページ(<http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/hikari/yuragi/>)を参照すること。

（研究項目）

A01 揺らぎ検出

A02 揺らぎ制御

A03 揺らぎと機能

業績紹介：蛋白質動力学に対する水和の影響を中性子散乱実験で観測

片岡幹雄

(奈良先端大物質創成・A02 計画研究代表者)

論文題目: "Hydration affects both harmonic and anharmonic nature of protein dynamics"

著者: Hiroshi Nakagawa, Yasumasa Joti, Akio Kitao, and Mikio Kataoka

雑誌巻号: *Biophys. J.* **95**, 2916-2923 (2008)

蛋白質は、体温環境下の水中で機能している。極低温や低水和の条件化では、蛋白質は機能しない。水和や熱揺らぎが蛋白質の機能に影響を与えていると考えられる。本研究では、蛋白質ダイナミクスに対する水和の効果を中性子散乱により調べた。

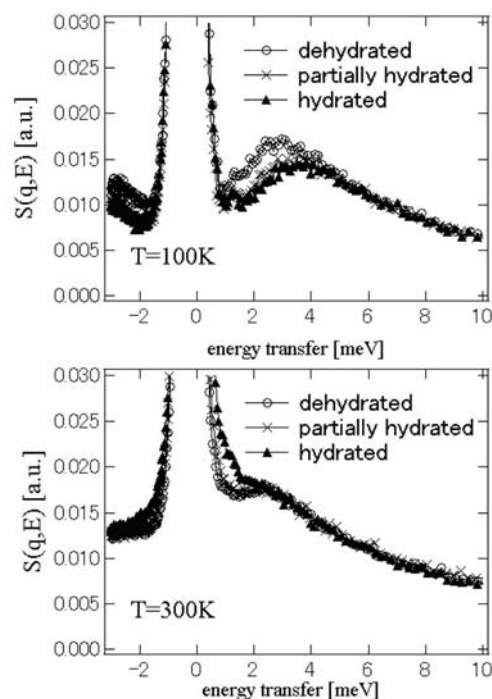
本研究では、Staphylococcal nuclease (SNase)を用い、3通りの水和率の試料を作製し、それぞれについて中性子散乱を用いた解析を行った。各試料の含水量は、熱天秤により評価した。脱水試料($h=0.12$ g D₂O/ g protein)は凍結乾燥により調整した、低水和 ($h=0.29$)、高水和 ($h=0.44$)試料はそれぞれ NaBr, KCl の飽和水溶液による蒸気拡散平衡により調整した。3種類のSNase試料について、それぞれ100Kから300Kの様々な温度で中性子非弾性散乱データを測定した。すべての測定温度で、5meV以上の高エネルギー領域では、水和量の違いによる蛋白質ダイナミクスの変化は観測されなかった(図)。高エネルギー領域のスペクトルは局在した運動に起因する。これらの運動には水和の効果が現れないことを意味する。一方、低エネルギー領域では、顕著に水和の効果が現れる。

100Kでは、すべての試料で、ボゾンピークと呼ばれる2-4meV付近のブロードなピークが観測される。ボゾンピークは蛋白質全体に広がった運動モードに起因し、蛋白質が弾性体であることを示す[1]。水和量が0.12 g D₂O/ g proteinより多いと、ボゾンピークの位置は高エネルギー側にシフトする(上図)。この結果は、水和水による水素結合が、蛋白質を硬くすることを示している。この効果は、低水和率でも起きる。

一方、300Kでは、高水和試料のみに、強い準弾性散乱が観測されるのに対し、低水和試料は脱水試料と同様のスペクトルを示す。(下図)。この結果は、準安

定構造間をジャンプする蛋白質の非調和運動を活性化するための水和量に閾値があることを示す。非弾性散乱データに現れる蛋白質ダイナミクスの水和量依存性は、低温(調和性)と常温(非調和性)で異なる。

中性子弾性散乱データの散乱方向依存性からは、蛋白質中の軽水素原子の平均2乗変位を見積もることが出来る。上記3種類の試料を用いて、蛋白質の平均2乗原子揺らぎの温度依存性を調べたところ、140K近傍と240K近傍に2種類の動力学転移が観られた。140Kの転移は、水和に依存せず、240Kの転移は、高水和試料でのみ観測された。これは、準弾性散乱の観測と一致している。



図：異なる水和量で測定した中性子散乱データ。(上図)100Kと(下図)300Kの結果を示す。

中性子散乱実験は、今後生体高分子研究において重要な役割を担っていくと期待される。現在東海村に建設中の大強度中性子散乱実験施設 J-PARC により、動力学解析による蛋白質の機能研究を促進していきたい。

参考文献

- [1] M. Kataoka et al., *J. Phys. Chem. Solid* **60**, 1285-1289 (1999).



シンポジウム報告

WATER IN BIOLOGICAL SYSTEMS

A French-Japanese workshop

Kyoto, Westin Miyako Hotel - November 26-27, 2008

平田文男

(自然科学研究機構・分子科学研究所・A03
計画研究代表者)

表記のシンポジウムが2008年11月26日から3日間、京都市の、ウエスティン都ホテルで開催された。このシンポジウムは日本とフランスの国交開始150周年を祝って、様々な研究分野で開催されている研究会のひとつである。

本研究会の企画者は京都大学医学部の福山秀直教授とフランス (NeuroSpin/CEA Saclay) の Denis Le Bihan 教授で、これまで両教授が行ってきたMRIの水の拡散強調画像の共同研究に端を発して、さらに水や液体の物理化学的研究と結合して発展させたいという趣旨で開催されたものである。研究会参加者は医学・生理学、物理化学および生物物理関係を中心に多彩な分野に及び、生体分子の機能における水の役割から京都の伝統文化と水の関わりまで、「水」を話題の中心にして学際的な研究報告と議論が行われた。(プログラムを添付)

本研究会で特に浮き彫りにされたのは生体機能やその疾病において分子レベルでの「水」がいかに重要な役割を演じているかということであるが、それは取りも直さず新学術領域「揺らぎと生体機能」で解明を目指している問題と軌を一にしている。今後、医学・生理学関係の研究者ともさらに交流を深めていく必要を強く感じた。

November 26th

9:00-9:30 **Welcome and opening:**

- Pr. Kohei Shiota (Dean, Kyoto University Graduate School of Medicine)
- Dr. Louis Armand (Tokyo French Embassy Science Advisor)

- Pr. Denis Le Bihan (NeuroSpin/CEA Saclay and Kyoto University)
- Pr. Hidenao Fukuyama (Kyoto University)

9:30-10:45 **From the water molecule to protein dynamics(I)**

- Paul Caro (French Academy of Sciences, Paris): Water, the life liquid
- Fumio Hirata (Molecular Science Institute, Okazaki): Statistical-mechanics theory of molecular recognition: water and other molecules recognized by protein

10:45-11:15 **Coffee break**

11:15-12:30

- Marie-Claire Bellissent-Funel (Laboratoire Léon-Brillouin, CEA-CNRS, CEA-Saclay): Protein dynamics and hydration water
- Mikio Kataoka (Nara Institute of Science and Technology, Graduate School of Material Sciences): Effect of hydration on protein dynamic

12:30-14:00 **LUNCH**

14:00-15:30 **Exhibition and Poster viewing**

15:30-16:00 **Coffee break**



「揺らぎと生体機能」ニュースレター

No. 2

26 January, 2009

16:00-17:15 **From the water molecule to protein dynamics (II)**

- Bernard Cabane (PMMH/ESPCI, CNRS UMR 7636/P6/P7, Paris): The physics of liquid water, hydrophobic molecules in water
- Giuseppe Zaccai (Institut Laue Langevin, Grenoble): Hydration water in biological membranes

restrains membrane shape and the diffusion of solute carriers

- Masahiro Sokabe (Nagoya University): Gating mechanisms of mechanosensitive ion channels: interactions among lipid, protein and water

12:30-14:00 **LUNCH**

17:30-18:30 **Key-note lecture**

Water and Kyoto history - Staining of clothes by water and dyes : Prof. Urakawa (Kyoto Institute of Technology)

Water life in Asian Countries: Kouzo Matsubayashi (Kyoto University)

14:00-15:15 **Water and cell physiology I**

- Gilles Bœuf (UMR 7628, Laboratoire Arago, University Paris VI/CNRS, Banyuls-sur-mer): Water metabolism and emergence from the oceans
- Denis Le Bihan (NeuroSpin, CEA, Saclay and Kyoto University): Membranes, water and diffusion

19:00-22:00 **BANQUET DINNER** with sake tasting (courtesy of Okura Shuzo, Fushimi) and kimono exhibition (courtesy of Toshiaki Nagakusa)

15:15-16:15 **Exhibition and Poster viewing + Coffee**

November 27th

9:00-10:15 **Water and membranes**

- Mounir Tarek (UMR CNRS UHP 7565, Université Henri-Poincaré, Nancy): Transport of water across cell membranes: Insight from molecular dynamics simulations
- Yoshinori Fujiyoshi (Kyoto University): Structure and function of water and ion channels

16:15-17:30 **Water and cell physiology II**

- Masaru Nakahara (Kyoto University): NMR of cell biology
- Hidenao Fukuyama (Kyoto University): Water and Medicine

10:15-10:45 **Coffee break**

17:30 **Farewell and concluding remarks** (H. Fukuyama, D. Le Bihan)

10:45-12:30

- Sachiko Tsukita (Osaka University): Tight junction-dependent regulation of physiological homeostasis
- Makoto Kinoshita (Kyoto University): Septin cytoskeleton

18:30 **Farewell party for speakers**

生物物理学会サテライトミーティング報告

芳坂貴弘

(北陸先端大マテリアルサイエンス・A02 計画研究代表者)

生物物理学会サテライトミーティング 3M5

新学術領域研究「揺らぎが機能を決める生命分子の科学」の説明と公募募集について

2008 年 12 月 5 日 福岡国際会議場 (福岡市博多区)

昨年 12 月の生物物理学会において、本新学術領域研究の説明と公募募集についてのサテライトミーティングが開催された。サテライトミーティングは、生物物理学会年会 3 日目の昼食時間 (11:45~13:00) を利用して、関連研究分野の様々な取り組みを発表・議論できる場として企画されたものであり、今回は科研費審査に関する説明や、会場となった九州地区の研究組織の活動報告などが並行して行なわれた。

本新学術領域の発表は、急遽開催が決まったためにプログラム冊子への掲載が間に合わなかったものの、会場にはかなり多くの方に参加して頂いた。まず、領域代表の寺嶋先生から、本新学術領域の概要について紹介が行なわれ、引き続き、各研究項目における狙いと計画研究についての紹介が行なわれた。A01 班の寺嶋先生からは、生体分子の揺らぎ検出のための新手法に関するご自身の研究の他、岡本先生の構造揺らぎを促進する分子シミュレーション手法の開発、加藤先生の NMR を利用したタンパク質および複合糖質の揺らぎ検出と機能関連の探索についての紹介が行なわれた。A02 班は芳坂から、片岡先生の天然変性タンパク質に着目した揺らぎと構造形成や分子認識の相関の解析、芳坂の非天然アミノ酸の導入技術とタンパク質揺らぎ研究への応用を、揺らぎ制御の例として紹介した。A03 班は上岡先生より、ご自身の研究であるハイブリッドリポソームと細胞膜の揺らぎが関与する制がん機能メカニズム研究、桑島先生のシャペロニンの構造揺らぎと機能発現との関係の解明、平田先生の生体分子と溶媒の構造揺らぎと共役した機能発現過程の理論的解明、に関して紹介が行なわれた。

いずれも時間が限られていたために研究の内容は詳しく述べられなかったこともあり、会場から質問を受

けることは無かったが、本領域の方向性は十分に理解して頂けたのではないと思われる。なお、公募研究の募集については、まだ詳細が決まっていない時点であったため、今回はその予告に留められた。



会場となった福岡国際会議場

以下、生物物理学会ホームページより引用

サテライトミーティング

3M5「新学術領域研究「揺らぎが機能を決める生命分子の科学」の説明と公募募集について

今年度より特定領域研究に代わり、新学術領域研究が設けられ、領域提案型の一つとして「揺らぎが機能を決める生命分子の科学」が採択されました。これは、揺らぎを中心にして生体分子の機能から生命現象を理解する生命分子科学の分野を創出するために、従来は化学・物理・応用化学・薬学・生命科学などの分野で活躍していた研究者を、この統一テーマの下に結集し、有機的な連携の下で、この融合分野を構築することを目標としております。このために、A01 揺らぎ検出項目、A02 揺らぎ制御項目、A03 揺らぎと機能項目という 3 つの項目を設け、それぞれに属する 8 つの計画研究と公募研究を加えたグループによる研究を行います。今年度は年明けに公募班の公募が行われる予定です。本説明会では、数人の計画研究メンバーによる研究紹介を通して、本新学術領域の御紹介と各研究項目でのねらいをご説明し、皆様の公募の参考に供したいと思います。

司 会 寺嶋正秀 (京都大学)

講演者 寺嶋正秀 (京都大学), 上岡龍一 (崇城大学), 芳坂貴弘 (北陸先端科学技術大学院大学)

「揺らぎと生体機能」第一回公開シンポジウム報告

山口拓実（加藤晃一代理）

（自然科学研究機構 分子科学研究所）

平成21年1月6日、新学術領域研究「揺らぎが機能を定める生命分子の科学」第1回公開シンポジウムが京都テルサにて行われた。会場には一時、立ち見も出るほど多数の参加者が訪れ、この新学術領域研究が掲げる「揺らぎと生体機能」への興味・関心の高さがうかがえた。8名の計画研究代表者による研究報告は、各グループのこれまでの研究成果を中心とした実に充実した内容であり、その多様性に驚かされるとともに、共通して内在する「揺らぎ」への想いと、それに対する独自のアプローチが大変印象的であった。誠に簡単にはあるが、以下に演題と講演内容を紹介させていただく。



まず始めに領域代表でもある寺嶋正秀先生が「エネルギー・構造揺らぎの時間分解検出法開発と反応機構」について講演された。体積収縮率や

熱膨張係数といった熱力学量により、反応過程における構造やエネルギーの変化を表すことができる。これらを特に時間分解で測定することで、従来の分光学的手法では捉えきれないごく短寿命の中間体を検出することができ、タンパク質-リガンド解離反応過程の揺らぎを見ることが可能となった。続いて海外出張のため不在となった加藤晃一先生に代わり、神谷由紀子博士から「超高磁場 NMR によるタンパク質・複合糖質の動的・高次構造解析」について発表が行われた。生体内で有益な機能を果たす糖鎖であるが、化学構造の多様性と内部運動の自由度の高さにより、分子科学的アプローチは困難である。これに対し加藤グループでは、安定同位体標識技術と超高磁場 NMR を駆使することで、その構造と機能の連関を明らかにしてきた。岡本祐幸



先生は、生体分子シミュレーションにおける種々の拡張アンサンブル法の有益性について紹介された。講演題目は「構造ゆらぎを促進する分子シミュレーション手法の開発と自由エネルギー計算」である。エネルギー極小状態への留まりを回避し、ペプチドの折り畳みやアミロイド繊維の形成開始過程を再現する様子は非常に興味深かった。以上の3グループは「揺らぎ検出」班に所属する。



「揺らぎ制御」班では片岡幹雄先生「天然変性蛋白質のモデル系開発と揺らぎと構造形成相関の解析」と、芳坂貴弘

先生「非天然アミノ酸導入技術を利用したタンパク質の揺らぎ解析」の講演が行われた。片岡先生は遺伝子操作手法による変異を駆使し、天然変性蛋白質のモデル系の構築を行ってきた。一方芳坂先生は、タンパク質へ非天然アミノ酸を部位特異的に導入する手法を開発した。人工合成した蛍光標識非天然アミノ酸を割り当てた4塩基コドンを経典子に組み込むことで、特定の部位に任意の化学修飾を施したタンパク質を作成できる。



続いて「揺らぎと機能」班の上岡龍一先生から「細胞膜及び人工膜の揺らぎが関与する制がん機能メカニズム」についての発表があった。リン

脂質と界面活性剤からなるハイブリッドリポソームはがん細胞の細胞膜へ蓄積し、がん細胞増殖抑制効果をもつことが見出された。興味深いことに、用いるリン脂質のアシル鎖長をわずかに変えることで、細胞死誘導の形式に変化が見られ、正常細胞への毒性が大きく異なった。桑島邦博先生はシャペロニン GroEL-GroES 複合体の作用機構に関する研究の現状について、「シャペロニンの構造揺らぎとフォールディング介助機能」として紹介された。ATP によってアロステリックに機能するシャペロニンの動作機構は、静的な構造解析のみでは明らかにすることはできず、溶液中での種々の測定による解析が重要であることがわかってきた。平田文男先生の「生体分子および溶媒の構造揺ら

ぎと共役した機能発現過程の理論的解明」では、理論科学によるタンパク質の構造揺らぎへのアプローチが示された。3次元 RISM 理論を用いることで、タンパク質の水和構造とともにタンパク質内部に存在する水についても描き出すことに成功した。また熱力学量に関しても、非常に精度良く求められることが示された。

このように、講演された計画研究代表者の研究背景は非常に多岐にわたっており、正直に申し上げると、著者にとっては難解に感じる部分も時にはあった。しかしながら、素晴らしい研究成果はもちろんのこと、「揺らぎ」への今後の展望をうかがっていると、次々に興味が沸き上がってきたのである。それは会場に訪れた多くの参加者も同様であったのではないかと思う。

実際に、シンポジウムでの質疑応答をはじめ、懇親会会場においても、至る所で分野を異にする研究者間での活発な議論、意見交換が行われていた。この新学術領域研究が目指す、「揺らぎと生体機能」という新たな研究領域の形成へ向け、まさに一歩が踏み出されたことを強く感じた。



なお、崇城大学ホームページにも今回のシンポジウムが TOPICS として掲載されています。

<http://www.sojo-u.ac.jp/site/view/contview.jsp?cateid=142&id=1230&page=1>



受付の様子



懇親会の様子



お世話になった寺嶋研の皆さん

片岡班員らの研究成果が新聞に掲載される。

A02 班、計画研究代表者の片岡幹雄博士と同グループの上久保裕生博士（連携研究者）、山口繁生氏（研究協力者）及び日本原子力研究開発機構の黒木良太博士のグループの共同研究により、蛋白質中の低障壁水素結合の存在が証明されました。この研究成果が産経新聞（平成 20 年 12 月 31 日）日刊工業新聞（平成 21 年 1 月 6 日）、フジサンケイビジネスアイ（平成 21 年 1 月 6 日）に掲載されました。また、時事通信（平成 20 年 12 月 30 日）からウェブで配信されました。基となった研究は Proc. Natl. Acad. Sci. USA（early edition）に平成 21 年 1 月 2 日付でオンライン公表されています。また、時事通信（平成 20 年 12 月 30 日）からウェブで配信されました。研究内容の詳細は、後日紹介する予定です。

産 経 新 聞
平成 20 年 (2008 年) 12 月 31 日 水曜日
14 版
総合 2

特殊な水素結合を発見

タンパク質のなかに高いエネルギーを持った特殊な水素結合があり、この結合が、光による情報を素早く伝達するなど重要な役割を果たしていることを奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科の片岡幹雄教授らの研究グループが、日本原子力研究開発機構との共同研究で世界で初めて証明した。今後、新しい分子設計が可能になり創薬分野などで期待される。論文は 30 日、米科学アカデミー紀要電子版に掲載された。

水素結合は、水素が酸素などの他の原子と結びついたもの。タンパク質などの分子の中では、この結合を介してプラスに荷電した水素原子が移動することでそれぞれの機能を発揮している。

奈良先端大など共同研究

片岡教授らが証明したのは、水素結合のうち、「低障壁水素結合」とよばれ、結合エネルギーが通常の 10 倍程度高いため、効率よく働けるとの仮説が 1990 年代に出されていたが、これまで証明されておらず、約 20 年にわたり存在の有無について論争が続いていた。

ノーベル化学賞を受賞した下村脩・ボストン大学名誉教授が発見したオワンクラゲの緑色蛍光タンパク質（GFP）の発光もこの結合が関与していると考えられている。

片岡教授らは、細菌が光を感じる際に働く光受容タンパク質を材料に、水素原子を直接観測できる「高分解能中性子結晶構造解析」という方法を開発し、発見に至った。

この結合は、タンパク質が反応していない通常の状態でも分子内にあり、光を吸収すると通常の水素結合にもどって情報を伝達しているなど新たなメカニズムも明らかになった。

片岡教授は「この結合を分子の設計に導入することにより、物質の生産を触媒するタンパク質の酵素としての機能を強化するなど有用な分子の開発にも役立つ」と話している。

タンパク質内、創薬に期待

タンパク質のなかに高いエネルギーを持った特殊な水素結合があり、この結合が、光による情報を素早く伝達するなど重要な役割を果たしていることを奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科の片岡幹雄教授らの研究グループが、日本原子力研究開発機構との共同研究で世界で初めて証明した。今後、新しい分子設計が可能になり創薬分野などで期待される。論文は 30 日、米科学アカデミー紀要電子版に掲載された。

たんぱく質に水素の特殊な結合＝新薬開発へ応用期待－奈良先端大など

12月30日7時29分配信 時事通信

水素原子が酸素や窒素の原子と非常に高いエネルギーで結び付く「**低障壁水素結合**」がたんぱく質にも存在することを、奈良先端科学技術大学院大と日本原子力研究開発機構の研究チームが30日までに確認した。低障壁水素結合を生み出し、酵素反応を活発にする新たな仕組みの医薬品開発につながると期待される。論文は米科学アカデミー紀要電子版に掲載される。

低障壁水素結合は、水素原子と酸素や窒素の原子との間が 2.6 オングストローム(1 オングストロームは 100 億分の 1 メートル)以下に接近し、エネルギー障壁が低くなった際に起きやすい。高圧など特殊な条件下にある有機低分子で起こることが知られ、たんぱく質では消化酵素の反応に関与しているとの説があったが、存在が直接確認されていなかった。

奈良先端科学技術大学院大の片岡幹雄教授らは、細菌で光センサーの役割を果たすたんぱく質について、X 線と中性子で結晶構造解析を行い、低障壁水素結合が存在することを突き止めた。

日刊工業新聞 21年1月6日 (朝) 22面

フジサンケイビジネスアイ

21年1月6日 (朝) 12面

タンパク質にも
特殊な水素結合

水素原子が酸素や窒素の原子と非常に高いエネルギーで結び付き「低障壁水素結合」がタンパク質にも存在することを、奈良先端科学技術大学院大と日本原子力研究開発機構の研究チームが確認した。低障壁水素結合を生み出し、酵素反応を活性化にする新たな仕組みの医薬品開発につながると期待される。

低障壁水素結合は水素原子と酸素や窒素の原子との間が2.5 Å (1 Å は100億分の1 cm) 以下に接近し、エネルギー障壁が低くなった際に起きやすい。タンパク質では消化酵素の反応に関与しているとの説があったが、存在が直接確認されていなかった。

奈良先端科学技術大学院大の片岡幹雄教授らは、細菌で光センサーの役割を果たすタンパク質について、X線と中性子で結晶構造解析を行い、低障壁水素結合が存在することを突き止めた。

たんぱく質中の存在解明

高エネルギー 水素結合

奈良先端大 原子力機構 新薬設計に応用へ

奈良先端科学技術大学院大学の片岡輝雄教授らは日本原子力研究所で、立つと考えられる。補化化合物の設計などに役
ければ分らない。低障壁水素結合は、水素供与原子と水素受容原子が同時に共有され、基底下の有最低分子

今回の研究で、Pb²⁺が不安定な状態でも、安定に低融性水素結合が存在することが分かった。

構と共同で、高エネルギー水素結合である「低障壁水素結合」が、たんに質にも存在することを解明した。今後、低障壁水素結合の高い結合エネルギーを利用し、薬物のなかに質への結合を安定化させるなど、新薬候補にかかわる光をあたえらるに期待する。