

I タンパク質内プロトン輸送機構の理論解析

Theoretical analyses of proton transport processes in Cytochrome *c* Oxidase

神谷克政・重田育照・押山 淳
Kamiya, K., Shigeta Y., Oshiyama, A.

立体構造と電子状態の間の表裏一体性に着目し、蛋白質の構造と機能の間の相関関係を電子論的に調べている。高分解能で立体構造が決定されているチトクロム酸化酵素に対し、本酵素が駆動するプロトン移動や電子移動の反応機構を、量子論に基づく第一原理電子状態計算により調べた。プロトン移動経路を構成するアミノ酸や水分子により形成される水素結合環境の機能的な重要性、および電子移動の構成要素であるヘム分子の機能的な物性が明らかになった。

II 人工 DNA の構造と安定性の理論解析

Theoretical analyses of structure and stability of artificial DNA

重田育照
Shigeta Y.

近年、DNA類似塩基を持つ人工DNAの合成が注目を浴びている。例えば、[H-Cu²⁺-H] (H: ヒドロキシピリドン) を5個並べた銅イオンを含む金属含有人工DNAが合成され、EPRの結果からCu-Cuの距離が $3.7 \pm 0.1 \text{ \AA}$ であるとしている。我々は、[H-Cu²⁺-H]の二量体や様々な金属含有人工DNAにおいて、金属イオン間の距離と励起スペクトルを指標とし、安定構造を求めた。また、金属の種類やカルコゲン原子の組み合わせを変えた人工DNAの安定性を見積もり、その分子設計を行っている。

III 生体ナノシステム解析のための 第一原理分子動力学計算法の開発

Development of first principle molecular dynamics for nano-bio systems

重田育照・押山 淳
Shigeta Y., Oshiyama, A.

ピコメートルサイズの現象は、量子力学に基づいている。特に、機能を司る化学反応を理解する為には、系の電子状態変化を解析する必要がある。一方、系を構成する粒子数が多くなると、動力学的揺らぎや統計力学的な取り扱いも必要になる。我々は、生体ナノシステム解析のため実空間密度汎関数理論+メタダイナミクス法を開発し、タンパク質内での構造揺らぎを伴う水素移動を研究している。また、水素の量子同位体効果を扱う新規手法開発も行っている。

発表論文 List of Publications

I-1 Kamiya K, Shigeta Y, Oshiyama A

“Effects of Hydrogen-Bonding Environments on Protonation States around the Entrance of Proton Transfer Pathways in Cytochrome c Oxidase”

AIP conference proceedings “Theory and Application of Computational Chemistry”, **1102**, 257-261 (2009).

I-2 Shigeta Y, Myachi H (東京大), Matsui T (東京大), Hirao K (東京大),

“Dynamic quantum isotope effects on multiple proton transfer reactions”

Bulletin of the Chemical Society of Japan **81**, 1230-1240, 2008.

I-3 Kamiya K, Yamamoto S (筑波大), Shiraishi K (筑波大), Oshiyama A (東京大),

“Significant Change in Electronic Structures of Heme Upon Reduction by Strong Coulomb Repulsion between Fe d Electrons”

Journal of Physical Chemistry B, **113**: 6866- 6872, 2009.

I-4 K. Kamiya, Y. Shigeta, A. Oshiyama,

“A novel proton transfer through peptide group in protein”

Theory and Application in Computational Chemistry 2008 (Invited presentation), Shanghai, China, 2008.

I-5 神谷克政・重田育照・マウロボエロ・白石賢二・押山 淳

「蛋白質の立体構造・電子状態・生物機能の間の相関関係の研究」

第 64 回日本物理学会年次大会 (Oral presentation)、立教大学、2009

II-1 Matsui T (東京大), Miyachi H (東京大), Sato T (東京大), Shigeta Y, Hirao K (東京大),

“Structural origin of copper ion containing artificial DNA: a density functional study”

Journal of Physical Chemistry B **112**, 16960-16965, 2008.

II-1 T. Matsui, Y. Shigeta, K. Hirao,

"Global and local structure of cisplatin and DNA base pair complex: a theoretical study"

2nd World Conference on Ehrlich II (Invited presentation), Nuernberg, Germany, 2008.

II-2 松井 亨 (東京大)・宮地秀明 (東京大)・佐藤 健 (東京大)、重田育照・平尾公彦 (東京大)

「金属イオンを含む人工 DNA の理論的研究」

第 2 回分子科学討論会 (Oral presentation)、福岡サンパレス、2008

II-3 Shigeta Y, Matsui T (東京大), Miyachi H (東京大), Nakanishi Y (大阪大),

Kitagawa Y (大阪大), Okumura M (大阪大), Hirao H (東京大),

- “Structural Stability of Artificial DNA: Theoretical Study”
3rd. ACCMS-VO international conference (Oral presentation) ,東北大学, 2009
- III-1 Pereverzev YV (Washington大) ,Pereverzev A (Washington大) , Shigeta Y,
Prezhdo OV (Washington大)
“Correlation functions in quantized Hamilton dynamics and quantal cumulant dynamics”
Journal of Chemical Physics **129**, 144104(7 pages), 2008.
- III-2 Shigeta Y,
“Quantal cumulant dynamics III: A quantum confinement under a magnetic field”
Chemical Physics Letters **461**, 310-315, 2008.
- III-3 Shigeta Y,
“Distribution function in quantal cumulant dynamics”
Journal of Chemical Physics **128** *Communication*, 161103 (4 pages), 2008.
- III-4 Hirata S (Florida 大) , Fan P-D (Florida 大) , Shiozaki T (東京大) , Shigeta Y,
“Single-reference methods for excited states in molecules and polymers”
「Radiation Induced Molecular Phenomena in Nucleic Acids-A Comprehensive Theoretical and Experimental Analysis-」
Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics Vol 5.. Chap. 2
P15-64, Ed. J. Leszczynski (Springer) 2008
- III-5 重田育照、
「電子ダイナミクスによる電子集団運動の解析」特定領域研究「実在系の分子理論」成果報告会
札幌シンポジウム (Invited presentation)、北海道大学、札幌、2008
- III-6 重田育照、
「キュミュラント変数による量子力学」特定領域研究「実在系の分子理論」若手勉強会 (Invited presentation)、伊豆長岡、2008
- III-7 重田育照
「熱ゆらぎと量子ゆらぎの動的分子理論」第 89 回日本化学会年会・日本化学会進歩賞受賞講演
(Invited presentation)、日本大学船橋キャンパス、2009
- III-8 Y. Shigeta,
“Quantum dynamics in terms of cumulant”
Theory and Application in Computational Chemistry 2008 (Invited presentation) ,
Shanghai, China, 2008.
- III-9 Y. Shigeta,
“Quantum mechanics in terms of cumulant”
13th Quantum systems in chemistry and physics (Invited presentation) , Lansing. USA,
2008.
- III-10 重田育照、
「キュミュラントによる量子動力学」
第 11 回理論化学討論会 (Oral presentation)、慶応大学日吉キャンパス、2008

大学院生命理学研究科

なし

科学研究費補助金等

- 1 科研費補助金（平成 20～21 年度） 若手研究 B 課題番号：
研究課題 プロトン結合電子移動反応の実時間解析：量子キュムulant 動力学法
研究代表者 重田育照
- 2 科研費補助金（平成 20～21 年度） 特定領域研究 課題番号：
研究課題 電子ダイナミクスによる電子集団運動の解析
研究代表者 重田育照
- 3 CREST・JST(平成 20～22 年度)
研究課題 計算機科学によるナノアーキテクチャ構築
研究代表者 押山 淳（東京大学教授・県立大客員教授）
- 4 兵庫県立大学特別教育研究助成金（平成 20 年度）奨励研究
研究課題 タンパク質構造解析における水素原子の量子論的位置決定法の確立
研究代表者 重田育照
- 5 兵庫県立大学特別教育研究助成金（平成 20 年度）奨励研究
研究課題 タンパク質構造解析における水素原子の量子論的位置決定法の確立
研究代表者 神谷克政