

様 式 F-7-1

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実施状況報告書（研究実施状況報告書）（平成 2 6 年度）

1. 機 関 番 号

1

4

6

0

3

2. 研究機関名

奈良先端科学技術大学院大学

3. 研究種目名

基盤研究(C)

4. 補助事業期間

平成 2 5 年度～平成 2 9 年度

5. 課 題 番 号

2

5

4

0

0

3

3

5

6. 研究課題名

ヘム蛋白質における多体効果の理論研究-放射光分光の視点から-

7. 研究代表者

研 究 者 番 号								研 究 代 表 者 名		所 属 部 局 名				職 名	
1	0	4	1	5	2	1	8	タグチ ムネタカ		物質創成科学研究科				助教	
								田口 宗孝							

8. 研究分担者

研 究 者 番 号								研 究 分 担 者 名				所 属 研 究 機 関 名 ・ 部 局 名				職 名	

9. 研究実績の概要

本研究は、鉄の多体効果に注目し、物性物理の土俵でヘムタンパク質を電子論的に議論することを目的としている。具体的には、放射光の物性研究で成功を収めた数値シュミレーション法をヘムタンパク質に適用し実験スペクトルと比較することで、そのさまざまな機能に関するヘム鉄の電子状態を理論的に解明することである。

本研究で挙げた具体的な計画項目は、①鉄の多体効果とポルフィリン環の強い混成効果とを同等に取り扱うことのできるクラスター模型の構築、②基質分子の可逆的な吸脱着による鉄の電子状態変化の機構解明、③ヘム鉄の局所的な構造変化が鉄の 3 d 電子状態に与える影響、の三つであった。

昨年度、①のクラスター模型の解析的模型の構築に成功したが、プログラミングの過程で予想していなかった計算機コードのバグがあることが判明していた。そのため、本年度はまずそのバグの修正を行い、その後、②の基質分子による鉄の電子状態変化の機構解明という二つ目のステップを集中的に行った。ミオグロビンのヘム鉄の第 6 配位に吸脱着する分子の典型分子としては、O₂、H₂O、CO、N₂等がある、が本研究ではこれらすべての基質分子の分子軌道を計算し、これらの分子とヘム鉄との吸着の様子を調べてきた。特に基質の違いにより共鳴線発光スペクトルにどのような変化をもたらすのか、電荷移動エネルギーの効果はどれくらいあるのか、ポルフィリン環の歪の効果はどれくらい重要なのか、スピン状態の変化する要因などのことを集中的に行った。その結果、当初の予想通り電荷移動エネルギーは基質によって大きく変化することが分かり、これが鉄の価数状態を変化させていることが明らかとなった。しかし、基質の変化によるスピン状態の変化や歪の効果が果たす役割についてはまだ解明できていない。

10. キーワード

- (1) 金属タンパク質
- (2) クラスタ計算
- (3) 共鳴X線発光分光
- (4)
- (5)
- (6)
- (7)
- (8)

11. 現在までの達成度

(区分) (3) やや遅れている。

(理由)
昨年度の理論模型のにおいて当初予想していなかったバグが発生しその修正を本年度の最初に行った。このバグの修正は取り除くことに成功したが予想以上に時間がかかってしまった。現在はその次のステップにはいっているがその影響がでているため当初の予定より若干の遅れが生じている。

12. 今後の研究の推進方策 等

(今後の推進方策)
バグの修正後は、当初の計画通りのステップ②に突入しており順調に研究は進行している。初年度での遅れを取り戻す必要があるため研究の速度を加速していく予定である。

(次年度使用額が生じた理由と使用計画)
(理由)
本年度購入した、大型計算機が予想より低価格で購入することができたため、少額(約160千円)ではあるが繰越が出た。
(使用計画)
次年度は、論文を出していかなければならないので、論文投稿費等として使用したい。

13.研究発表(平成26年度の研究成果)

(雑誌論文) 計(4)件 うち査読付論文 計(0)件

著 者 名		論 文 標 題			
T. Usui, Y. Tanaka, H. Nakajima, M. Taguchi, A. Chainani, M. Oura, S. Shin, N. Katayama, H. Sawa, Y. Wakabayashi and T. Kimura		Observation of quadrupole helix chirality and its domain structure in DyFe ₃ (BO ₃) ₄			
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
Nature Materials		無	13	2 0 1 4	611-618
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
DOI: 10.1038/NMAT3942					

著 者 名		論 文 標 題			
L. S. R. Kumara, O. Sakata, A. Yang, R. Yamauchi, M. Taguchi, A. Matsuda, and M. Yoshimoto		Hard X-ray photoelectron spectroscopy of Li _x Ni _{1-x} O epitaxial thin films with a high lithium			
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
The Journal of Chemical Physics		無	141	2 0 1 4	044718 1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
http://dx.doi.org/10.1063/1.4891366					

著 者 名		論 文 標 題			
A. Chainani, M. Matsunami, M. Taguchi, R. Eguchi, Y. Takata, M. Oura, S. Shin, K. Sengupta, E. V. Sampathkumaran, Th. Doert, Y. Senba, H. Ohashi, K. Tamasaku, Y. Kohmura, M. Yabashi, and T. Ishikawa		Electronic structure of CeCuAs ₂			
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
Physical Review B		無	89	2 0 1 4	235117 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.235117					

著 者 名		論 文 標 題			
Sh. Yamamoto, M. Taguchi, M. Fujisawa, R. Hobara, S. Yamamoto, K. Yaji, T. Nakamura, K. Fujikawa, R. Yukawa, T. Togashi, M. Yabashi, M. Tsunoda, S. Shin, and I. Matsuda		Observation of a giant Kerr rotation in a ferromagnetic transition metal by M-edge resonant magneto-optic Kerr effect			
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
Physical Review B		無	89	2 0 1 4	064423 1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.064423					

(学会発表) 計(1)件 うち招待講演 計(1)件

発 表 者 名	発 表 標 題 【発表確定】	
田口宗孝	Theory of core-level x-ray spectroscopy for Fe based mixed-valence systems	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
Kick-off Workshop "Computing novel functions in low-dimensional systems" (招待講演)	2015年02月16日～2015年02月16日	千葉大学(千葉県千葉市)

[図書] 計(0)件

著 者 名	出 版 社		
書 名	発行年	総ページ数	

14.研究成果による産業財産権の出願・取得状況

(出願) 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

(取得) 計 (0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

15.備考