

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28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) (一般)		
4. 補助事業期間	平成25年度～平成29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 田口 宗孝	物質創成科学研究所	特任助教

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主な目的としている。具体的には放射光分光の物性研究にて成功を収めた数値シミュ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様々な機能に関するヘム鉄状態の電子状態を理論的に解明することである。

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

本年度までに、上記の三つの目標を達成するための理論模型の構築は終了し、共鳴X線発光、X線光電子分光、X線吸収分光のスペクトル計算もほぼ終了した。本来は、実験スペクトルとの比較を行いながらパラメーターの調整を行う予定であったが、当初予想していた実験の進展状況が遅れており実行できていない。そこで様々な状況を想定し、パラメーターを様々に振ることで理論から予言するという方向に方針転換し現在論文を執筆中である。

また本研究の派生として、このヘムタンパク質とほぼ同じ状況が混合原子価化合物でも明らかとなった。我々はX線吸収分光スペクトルの理論解析からNaCaCr2O4が負の電荷移動状態と正の電荷移動状態が混在することを明らかにした。この状況は正にヘム鉄に基質分子が吸脱着する際に起きる電子状態の変化に良く似ている。現在その論文をPhysical Review Lettersに投稿中である。

10. キーワード

(1) 金属タンパク質

(2) クラスター計算

(3) 共鳴X線発光分光

(4) 混合原子価状態

(5)

(6)

(7)

(8)

11. 現在までの進捗状況

(区分)(2) おおむね順調に進展している。

(理由)

昨年度まで、プログラムのバグが多数見つかるなどして当初の予定からやや遅れ気味であったが、昨年度中にプログラムのバグは完全に修正された。これによりX線光電子分光やX線吸収分光、共鳴X線発光分光のスペクトルがけいさんできるようになり、上記の遅れを挽回することができた。

12. 今後の研究の推進方策 等

(今後の推進方策)

まずは、現在執筆を行っている原稿を仕上げ論文を投稿したい。

また、現在の計算プログラムは活性中心を鉄に限らずCoやNiなどの別の遷移金属原子への拡張が容易であるので、Co錯体やNi錯体の計算へと拡張を行いたい。

(次年度使用額が生じた理由と使用計画)

(理由)

(使用計画)

13. 研究発表（平成28年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計(0)件 / うち査読付論文 計(0)件 / うち国際共著 計(0)件 / うちオープンアクセス 計(0)件

著者名	論文標題				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）					
オープンアクセス					

〔学会発表〕 計(0)件 / うち招待講演 計(0)件 / うち国際学会 計(0)件

発表者名	発表標題	
学会等名	発表年月日	発表場所

〔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

(課題番号： 25400335)

(注)・印刷に当たっては、A4判(縦長)・両面印刷すること。

(3/4)

〔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. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計(0)件

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

16. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

(1) 国際共同研究 : -

17. 備考

--