

京都大学教育研究振興財団助成事業  
成 果 報 告 書

令和4年4月27日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団

会 長 藤 洋 作 様

所 属 部 局 理学研究科

職 名 准教授

氏 名 竹田 一旗

助 成 の 種 類	令和 3 年度 ・ 研究活動推進助成			
申請時の科研費 研究 課 題 名	分子内相互作用による電子分布制御のタンパク質電荷密度解析			
上記以外で助成金 を 充 当 した 研 究 内 容	紫外線照射によるDNA構造変化の研究			
助成金充当に関 わる共同研究者	(所属・職名・氏名)該当なし			
発表学会文献等	日本物理学会第77回年次大会にて口頭発表(以下の3件)「緑色蛍光タンパク質における発色団一周辺残基間相互作用の量子化学的検証」、「バクテリオロドプシンK中間体におけるレチナール一周辺残基間相互作用の量子化学的検証」、「高輝度紫外線レーザー照射によるDNA構造変化の結晶学的研究」			
成 果 の 概 要	研究内容・研究成果・今後の見通しなどについて、簡略に、A4版・和文で作成し、添付して下さい。(タイトルは「成果の概要／報告者名」)			
会 計 報 告	交付を受けた助成金額	1,000,000	円	
	使用した助成金額	1,000,000	円	
	返納すべき助成金額	0	円	
	助成金の使途内訳	費 目	金 額	
		備品(計算用高性能PC)	676,500	
		英文校閲	57,970	
		消耗品	203,207	
試薬	62,323			
当財団の助成に つ いて	本助成金は研究を継続するうえで大変に助かりました。論文掲載料に使用したい場合には査読者や編集者の都合や判断で論文受理や支払いの時期が読めないの、その用途だけに絞った期限延長制度があるとありがたいです。			

## 成果の概要／竹田一旗

「分子内相互作用による電子分布制御のタンパク質電荷密度解析」では、光応答性タンパク質の基底状態および光反応中間体についての超高分解能 X 線電荷密度解析を実施する研究を提案した。本研究助成では、予備的な研究に不可欠な試料や結晶の調製をおこなうとともに、計算用高性能 PC を購入して X 線電荷密度解析と量子化学計算を組み合わせるための計算科学的研究をおこなった（研究成果 1 および 2）。また、タンパク質以外の生体高分子にも研究対象を拡張するために、DNA の紫外線損傷についての予備的な研究もおこなった（研究成果 3）。これらの成果によって、反応の進行による電荷密度や分子内相互作用の変化を実験と計算を組み合わせる方法で研究する方法を確立し、タンパク質機能の発現機構に迫るための基盤を構築することができた。各研究成果の概要については以下に個別に記述する。

（**研究成果 1**）微生物型ロドプシンの一種であるバクテリオロドプシンは光駆動性プロトンポンプである。その K 中間体ではレチナールの光異性化に伴う構造変化がポリエン鎖や周辺残基に生じている。しかしながら、K 中間体におけるレチナールの正確なコンフォメーションは明らかとなっていない。本研究によって高分解能で結晶構造を決定して量子化学計算をおこない、K 中間体に見られるポリエン鎖の歪や周辺残基との相互作用の詳細を明らかにした。

（**研究成果 2**）緑色蛍光タンパク質はオワンクラゲ由来の蛍光タンパク質である。その発色団はタンパク質の中心部分でアミノ酸や水分子と相互作用を形成している。水素原子位置を含む精密構造をもとに量子化学計算をおこない、周辺残基や水分子が発色団の電子状態に及ぼしている影響を解明した。

（**研究成果 3**）DNA は紫外光を吸収して分解したり本来はみられない結合を形成したりする。そこで、紫外線の照射による DNA 構造の変化について、時分割回折実験を計画した。今回はその予備的研究として、紫外光照射によって実際に光反応が進行するかを確認した。その結果、紫外光が DNA 結晶構造に与える影響の特徴を明らかにすることができた。