

ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

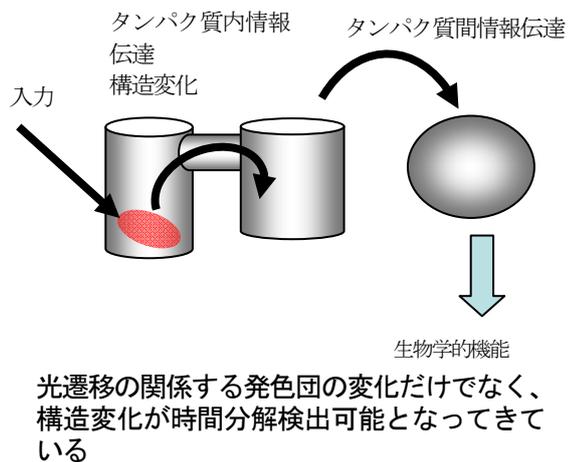
大項目	2. 化学反応ダイナミクス
中項目	2-1. 励起分子素過程と光電子移動ダイナミクス
小項目	2-1-9. タンパク質構造ダイナミクス

概要（200字以内）	
<p>レーザーと光検出器の進展により、高時間分解能で光遷移の関与するタンパク質反応ダイナミクスが検出できるようになった。また、構造変化に伴うエネルギーダイナミクスも時間分解で研究が可能となった。更に、一分子測定技術の進展により、タンパク質個々の動きも観測された。今後、1分子検出による高速反応ダイナミクス追跡、タンパク質構造変化に伴うシグナル伝達などのステップを明らかにする研究が進むであろう。</p>	
現状と最前線	
<p>タンパク質反応の研究の中でも、特に光機能性タンパク質の反応は、近年大きく進展している分光学との相性がよいため、比較的多くの物理化学的測定がなされ、タンパク質構造ダイナミクス研究に取り組まれている代表といえる。レーザー光でトリガーをかけられるため、反応素過程ダイナミクスを優れた時間分解能で明らかにされている。特に、光源と検出器に関する技術的進展は、こうした研究を大きく発展させた。</p> <p>光源で言えば、レーザーの開発とその性能の進展により、励起状態と反応との関係が詳細に明らかにされるようになった。例えば、単一周波数レーザーにより高エネルギー分解ができるようになり、より詳細な電子構造に関する知見がえられるようになった。また、ピコ秒、フェムト秒へのパルス幅の短縮により、より高時間分解能が得られるようになり、側鎖の振動・回転などのダイナミクスが明らかとなり、電子励起状態を扱う理論の進展も手伝って、タンパク質構造変化のトリガーとなる反応の初期過程解明が目覚ましい。</p> <p>一方で検出器の進展により、より広い波長領域での検出、より微弱な光の検出が可能となっている。例えば近年大きく発展した一分子測定技術は、一つの分子を可視化することで、個々のタンパク質の性質を調べることを可能とした。</p>	

また、最近の新しい方法開発によって、こうした構造変化に伴う、エネルギーの流れや分子体積も時間分解で追えるようになってきた(概要図)。こうした研究は、分光学的な手法と相補的であり、従来は隠されていたダイナミクスを明らかにできるという意味で、これからの発展が期待される。

局所的な反応がどのようにタンパク質に受け継がれていくかを明らかにするために、タンパク質の全電子計算もなされ始めている。原子分解能でタンパク質構造変化がどのように誘起されていくのかを知るために、光トリガーとX線結晶構造解析とを結びつけた時間分解X線構造解析がなされ始めており、実時間で原子が反応とともに動いているのを可視化できるようになったのは、反応の理解に重要である。

こうした研究は、光受容タンパク質の理解だけでなく、もっと一般的な化学受容器系の理解のためにも使えるであろう。



将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

蛋白質へのシグナルの入力、蛋白質内部の構造変化によるシグナルの伝達、蛋白質からのシグナルの出力などのステップを明らかにする研究が進むであろう。特に、反応の高効率性、高選択性などを理解するために、実際に働いているタンパク質環境での励起状態やその反応を知るための研究がより進展すると考えられる。タンパク質の電子状態について、全電子計算は、計算機および理論の発展によりこれからも発展するであろう。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

溶液中での時間分解(小角)X線散乱や時間分解(小角)中性子散乱も、溶液中での構造変化についての知見を得るために進める必要がある。分子間相互作用の時間発展を明らかにするために、より高感度で高時間分解能のバイオセンサーの開発が不可欠である。

キーワード

構造ダイナミクス、非分光的手法、1分子検出、イメージング技術、MDシミュレーション

(執筆者： 寺嶋 正秀)