

藤井正明

東京工業大学（研究院）化学生命科学研究所

神奈川県横浜市緑区長津田町 4259

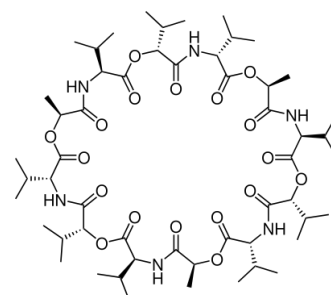
mfujii@res.titech.ac.jp



## イオン認識タンパク質バリノマイシンの冷却イオン分光 2 —水和の新たな意味

本プロジェクトでは分子認識に関わる生体分子の機能中心を切り出したモデル系と種々のリガンドとの複合体に対してエレクトロスプレーイオン化と冷却イオントラップを融合したレーザー分光装置により赤外・紫外スペクトルを測定し、分子選択メカニズムを分子論的に解明することを目指している（ボトムアップアプローチ）[1]。測定手法はイオントラップを用いる原子・核物理とも共通性があり物質階層を超えた原理に対する寄与を目指している。

バリノマイシン V は  $K^+$  を脂質二重膜を通して輸送し、反対側で放出するイオノフォアの一つであり、Crown Ether のモデルとなった抗生物質の一つである。この環状分子は  $Na^+$  に比べて  $K^+$  の結合定数が  $10^3 \sim 10^4$  倍高く、 $K^+$  を選択的に結合することが分かっている[2]。昨年度、バリノマイシン-アルカリ金属錯体およびその水和クラスターをエレクトロスプレーで真空中に取り出し、赤外スペクトルで構造を明らかにした。これにより錯体



単体では全て  $C_3$  対称性を保持した構造が保たれて明確なイオン選択性が現れないが、水和すると  $K^+$  と  $Na^+$  で明瞭な構造変化が見られ、イオン選択性には水和と不可分な関係であることを分光学的に示した。本年度は水和で生じる異性体についても構造解析を行い、V が  $K^+$  を輸送する際にも水分子が重要な役割を果たしている可能性を見出したので報告する。詳細は発表で述べるが、イオン認識に対する水分子の役割は  $K^+$  イオンチャネルに関しても近年盛んに議論が行われており[3]、時間が許せばイオンチャネルを含めてイオン認識と水和の関係に関して議論したい。

### 参考文献

- 1) T. Sekiguchi, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57**(20), 5626-5629 (2018); M. Tamura *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, **10**(10), 2470-2474 (2019); S. Ishiuchi *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **21**(2), 561-571 (2019).
- 2) M. C. Rose and R. W. Henkens, *BBA*, **372**(2), 426-435(1974).
- 3) K. R. DeMarco, S. Bekker and I. Vorobyov, *J. Physiol.*, **597**, 679-698 (2019); C. I. Lynch, S. Rao and M. S. P. Sansom, *Chem. Rev.*, **120**, 10298-10335 (2020).