

弘 報 170

京都大学大学院理学研究科・理学部

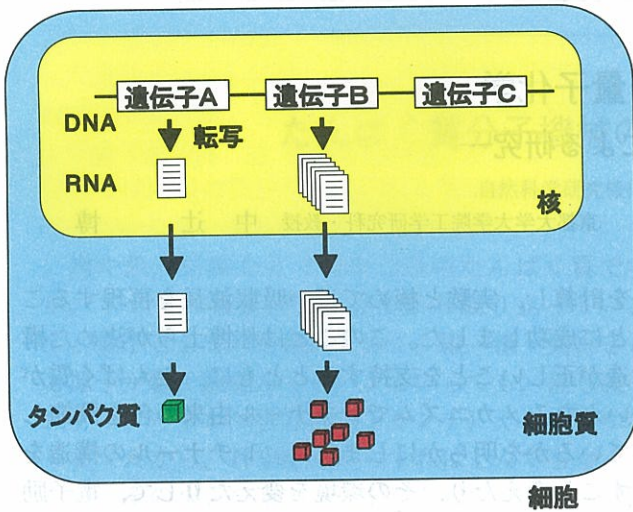
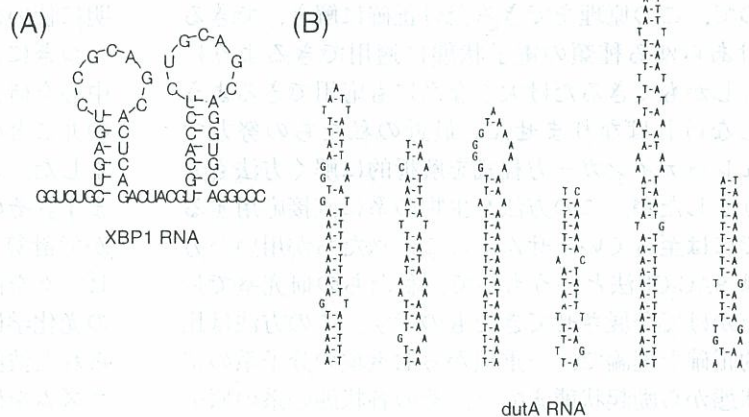


図1 遺伝子の転写制御機構

DNA にコードされた遺伝子 A の情報は、RNA に転写されたのち核から細胞質へ運ばれ、RNA の情報をもとにタンパク質 A が合成される。この細胞にとって必要な遺伝子 (遺伝子 B) は RNA の転写が盛んに行われ、結果としてタンパク質 B も大量に合成される。不要な遺伝子 (遺伝子 C) は転写が行われず、タンパク質の合成も起こらない。

図2 dutA RNA と XBP1 RNA に存在する不思議な構造

RNA (mRNA) はそこに書かれている情報 (タンパク質の設計図) が重要であると一般に考えられているが、RNA 分子の構造自体に機能がある例が次々と知られるようになっていく。XBP1 RNA にみられるステムループ構造 (図 2A) は、XBP1 RNA が加工される際に切断部位を決める目印になっている。dutA RNA にはステムループ構造が複数存在しているが、その機能については解明されていない (図 2B)。



(関連記事本文 4 頁)

目 次

平成16年度玉城嘉十郎教授

記念公開学術講演会について..... 2

コ ラ ム

「化学物理と京大理学部」 谷村 吉隆 教授..... 4

研 究 紹 介

「転写制御機構と遺伝子の多様性」
吉田 秀郎 助教授..... 4

リサーチフェローの研究紹介..... 5

理学研究科・理学部における主要会議等.....13

教授会メモ (12/16, 1/20, 2/10, 2/17)13

研究科会議メモ (12/2, 1/13, 2/3).....17

学位審査合格者一覧.....19

人事異動.....19

訃 報.....19

平成16年度 玉城嘉十郎教授記念公開学術講演会について

第43回の標記講演会は、「蛋白質機能を先端化学で観る」をテーマとして、平成16年10月28日（木）午後3時から、理学2号館第1講義室で行われた。

講師は、中辻博京都大学大学院工学研究科教授と、木下一彦自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンター教授だった。当日は、玉城記念講

演会委員会委員長寺嶋正秀教授による開会の辞、梶本興亜教授の挨拶につづき、中辻博教授、ついで木下一彦教授の講演が約2時間にわたって行われた。

講演会には、理学部・理学研究科の学生、大学院生、教員、名誉教授の方々のほか、一般の聴講者も参加し、講演後は活発に質疑応答が行われた。

光合成細菌の量子化学

—SAC-CI 理論による研究—

京都大学大学院工学研究科・教授 中辻博



理論化学の立場から生物化学やたんぱく質の機能を研究しようとする、現状の理論だけではどうしても無理があり、これを作るところからしなければなりません。生命現象といえども量子力学や統計力学の原理の具現化に違いないので、この原理をできるだけ正確に解き、できるだけあらゆる種類の電子状態に適用できるようにし、しかもできるだけ大きな系にも応用できるようにしなければなりません。最近の私たちの努力でシュレーディンガー方程式を解析的に解く方法も分かりましたが、この方法を生物の系に直接応用するまでには至っていません。ここで私たちが用いた方法は SAC-CI 法というもので、私たちの研究室で長年をかけて発展させてきたものです。この方法は比較的正確な理論で、一重項から七重項の分子系の基底状態から励起状態までを、その各状態の系の原子核に働く力もふくめて計算できる方法で、一電子的な励起状態から多電子的な励起状態まで計算することができます。最近この方法はガウシアン・プログラムに載り、誰でも容易に使えるようになりました。

この方法を使ってレチナル蛋白による色の調節機構を研究しました。これは福井謙一記念研究センターの林重彦博士、理学部の加藤重樹博士、工学部の長谷川淳也博士らとの共同研究になるものです。レチナル蛋白にはさまざまな色のものがあり、林博士らは QM/MM 法を用いて理論的にその構造を研究していました。そこで私たちはその構造を用いて SAC-CI 法でこれらのレチナル蛋白の励起状態

を計算し、実験と極めて近い吸収波長を再現することに成功しました。このことは林博士らが決めた構造が正しいことを支持するとともに、たんぱく質がいかなるメカニズムでレチナル由来の色を調節しているかを明らかにしました。レチナルの構造をすこし変えたり、その環境を変えたりして、電子励起に必要なエネルギーをチューニングしています。これらの方法をさらに視覚を司る3つのコーンの解明に使いたいと思います。

つぎに、この方法を使って紅色光合成細菌の反応中心を研究した例を紹介します。まずこの反応中心の丸ごとのスペクトルを SAC-CI 法を使って同定しました。この反応中心には11個の色素が含まれています。その励起状態を反応中心のたんぱく質のなかで計算し 0.13 eV の平均誤差で観測されているピークを同定しました。この結果は今後の反応中心の光化学研究の出発点になるものです。つぎに、得られた波動関数を使って反応中心の電子移動のメカニズムを研究しました。私達の疑問は、なぜ電子移動は L-鎖のみを使うのか、なぜ反応中心における電子移動はそんなに効率が良いのか、なぜ電荷の再結合は起こらないのか、そしてこれらの機能の中でたんぱく質の役割は何か、にありましたが、この SAC-CI 研究によってある程度これらの疑問を解決することができました。L-鎖選択性は生物構造化学に要因があり、各色素間の原子間距離の短い特定の箇所を狙って電子は移動していること、スペシャルペアーから隣の色素への電子移動は互いの LUMO がうまく近くに局在化していて都合が良いのに対し、戻る向きの電子移動については、スペシャルペアーの HOMO が色素の LUMO からは遠くに局在化しており、実質、遠距離電子移動になっ

て起こらないことが明らかになりました。たんぱく質の役割は、スペシャルペアーからフェオフィチンへの電子移動については各色素を空間的に有効な位置に固定する働きがおもで、直接電子移動にかかわっているわけではありませんが、次のフェオフィチンからメナキノン、ユビキノンへの電子移動については、たんぱく質のπ電子を持つ残基が電子移動の道を提供しており、たんぱく工学によって電子移動の効率をコントロールすることも可能です。

反応中心における光駆動型電子移動はプロトンを

ポンプアップするためのエンジンですが、上に述べた電子移動とカップルするプロトン移動のメカニズムはまだ良く分かっていません。是非解明したいと思います。これについてはまだまとまった成果はでていません。

いずれにせよ SAC-CI 理論などの量子化学的な理論は、化学や生物における現象の本質を理解しようとする時欠くことのできない道具であり、その更なる発展と巧みな利用が望まれます。