3P133

水溶液内分子の電子状態と溶媒和構造

○佐藤 啓文、榊 茂好（京大院・工・分子工学）

分子の電子状態やそれを取り巻く溶媒和の構造を理解するためには、統計力学のみならず量子化学的な観点がいずれも重要になる。特に化学反応を追跡する場合は電子状態の変化は本質的に重要であり、これらを包括的に取り扱える理論が必須となる。我々は分子性液体の積分方程式理論と非経験的分子軌道法を組み合わせた理論を開発・発展させ（RISM-SCF/MCSCF法）、これまで様々な化学反応系についての知見を得て来た。本講演ではこれらのレビューをするともに、最近開発している、水溶液中の分子の状態を追跡するために有用な幾つかの手法について発表する。

H. Sato, S. Sakaki : Electronic and solvation structure of molecule in aqueous solution

3P135

Magnetic tests and ferromagnetic resonance on *Daphnia* resting eggs

○坂田 真信¹、川崎 たまみ²、渋谷 俊道³、鶴田 進⁴、吉村 英恭⁴、並木 秀男¹（¹早大院・理工・生命理工、²早大・理工総研、³早大・物性計測センターラボ、⁴明大院・理工学・生物物理）

Daphnia normally reproduce by parthenogenesis. In unfavourable environments, however, robust resting eggs are induced after they switch to sexual reproduction. Resting eggs can remain viable for decades and survive in the harsh environment of a predator's digestive system. However, there is a little physico-chemical information about the resting eggs itself. A previous study reported the existence of magnetic material in *Daphnia* resting eggs (Kawasaki et al., *Zool Sci.*, 2004). To further study of a magnetic characteristic of *Daphnia* eggs, field-cool (FC) and zero-field-cool (ZFC) measurements were investigated by superconducting quantum interference device (SQUID). FC and ZFC measurements showed that both of (1) superparamagnetic particles and (2) magnetic particles which size is bigger than superparamagnetic particles, exist in the eggs. A detection of FMR of the eggs was also investigated by electron spin resonance (ESR) spectroscopy. Compared with FMR line patterns of previously reports in which FMR patterns of magnetite in ants and magnetotactic bacteria were shown, some characteristics of FMR were also detected from the spectrum of *Daphnia* eggs.

M. Sakata, T. Kawasaki, T. Shibue, S. Tsuruta, H. Yoshimura and H. Namiki : Magnetic tests and ferromagnetic resonance on *Daphnia* resting eggs

3P134

蛋白質の ab initio フラグメント MO 計算 : FKBP - リガンド複合体の相互作用と構造活性相関

○仲西 功¹、Fedorov Dmitri²、北浦 和夫^{1,2}（¹京大院・薬、²産総研）

Fragment MO (FMO) 法を用いると、蛋白質をアミノ酸単位に分割したフラグメントとそれらのペアについて ab initio MO 計算を行うことにより、蛋白質全体のエネルギーを求めることができる。我々は、FK506 binding protein (FKBP) と結合アフィニティーの異なる4種のリガンド分子との複合体について FMO 計算を行い、蛋白質とリガンドの相互作用について考察した。まず、実験構造に水素原子を付加した後、FMO-RHF/3-21G 計算で複合体中のリガンドの構造を最適化した。最適化したリガンドの構造は、結晶中において隣接分子の影響を受けていた部位は大きく変化したものの、その他の部位、特に FKBP との結合インターフェイスに相当する部位にはほとんど変化がなかった。これらの構造で、電子相関を考慮した FMO-MP2/6-31G(d) 法でエネルギー計算を行ったところ、電子相関エネルギーは分子間相互作用エネルギーの60~70%となり、これらの系においては電子相関エネルギー（分散力）が重要であることが明らかとなった。また、分子間の水素結合を詳細に解析すると、水素結合サイト周辺のアミノ酸残基が相互作用の強さに影響を与えていることも明らかとなった。4種のリガンドの FKBP に対する結合アフィニティーの差は、Kd 値で500倍程度であるが、結合自由エネルギーに換算するとわずか4 kcal/mol にも満たない。気相中における FMO 法による相互作用エネルギーの計算値では、この差が40 kcal/mol 以上となったが、両者の間には良い相関があることが分かった。溶媒効果、複合体形成時のリガンドの変形エネルギー及び複合体のエントロピー変化などについても検討を行い、これらを考慮することで結合エネルギー実験値のオーダーに近づくことが分かった。

I. Nakanishi, Dmitri G. Fedorov and K. Kitaura : Ab initio fragment MO calculations of whole protein-ligand complexes: FK506 binding protein with high affinity ligands

3P136

アクチン・ポリマーコンプレックスの形状と成長

○権 赫準¹、敷中 一洋¹、角五 彰¹、古川 英光¹、Gong Jianping^{1,2}、長田 義仁¹（¹北大院理、²（独）科学技術振興機構）

<緒言>アクチンは細胞内で様々な結合蛋白質との相互作用することによってネットワークやバンドルなどの多様な構造体を形成している。しかし、アクチン構造体の形状や成長を決める物理化学的な原理はまだ分かっていない。一方、アクチンはポリアニオンとしてポリカチオンとの相互作用によって大きなコンプレックスを形成するので、我々は単純な系におけるアクチンコンプレックス形成を観察し、アクチン構造体の形状や成長を決める基本原理を物理化学的観点から調べた。<結果・考察>ポリカチオン濃度 (CP) と KCl 濃度 (CS)、二つのパラメータを変えた時に形成されるアクチンコンプレックスを調べた結果、6種類の相が観察された。ポリカチオンの濃度が低い時には native の状態 (I) で存在するが、ある濃度からはコンプレックスが形成し始め、native とコンプレックスが同時に存在する共存状態 (II) が存在した。その濃度以上になると全体がコンプレックス状態になり、その状態で CP と CS が低い時にはネットワーク状態 (III)、CP と CS が高くなると branch 状態 (IV)、さらに高くなるとバンドル状態 (V) になることが観察された。また、さらに CP と CS がもっと高くなるとアクチンが charge inversion によって+電荷になり、native 状態 (VI) になった。この結果はアクチン間の反発力とポリカチオンによる結合力のバランスによると考えられる。また、コンプレックスの長さ方向と太さ方向の成長を調べた結果、互いに独立に成長していくことが観察された。この結果から長さは形成される核の数によって、太さは反発力と結合力のバランスによって独立に決められると考えられる。この研究は細胞内のアクチン構造体の形状や大きさを決める基本原理の解明につながると思われる。

H. J. Kwon, M. Shikiniaka, A. Kakugo, H. Hurukawa, J. P. Gong and Y. Osada : Structural polymorphism and growth of actin complex in polyelectrolyte system