

令和 5 年 6 月 21 日現在

機関番号：12608

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2019～2022

課題番号：19K22163

研究課題名(和文) DESI・冷却イオン分光によるコンフォメーションイメージング法の確立

研究課題名(英文) Development of conformational imaging technique combining of DESI and cold ion spectroscopy

研究代表者

石内 俊一 (Ishuchi, Shun-ichi)

東京工業大学・科学技術創成研究院・准教授

研究者番号：40338257

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,900,000円

研究成果の概要(和文)：既存の冷却イオントラップ質量分析装置を改造し、自作の脱離エレクトロスプレーオン化(DESI)装置を取り付けたシステムを構築した。モデル試料に対してDESI法を適用し、生成したイオンを冷却イオントラップに捕捉して赤外スペクトルを測定した。気相中で安定な構造のみが観測されたが、DESIの条件を変えることで溶液中で安定な構造も観測できることが分かった。気相中で安定な構造に変換するのを抑制する条件を検討したところ、気相中の水分子などが変換反応の触媒になっていることが分かった。DESIにより試料のその場の状態の情報を得るためには、DESI部の雰囲気精密に制御する必要があり、その指針が明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

質量イメージングと分光測定を組み合わせることで、分子状態の空間分布を測定できる技術を確立できる。これは、例えば、生体内での物質輸送と同時に運ばれた分子のはたらきについても可視化できるため、医薬品開発や材料開発などに大いに役立つと期待される。この技術の実現にあたり、その場の状態のまま分子をサンプリングする方法の確立が必須である。本研究では、DESI法を分子の局所サンプリング法として用いる場合に、その場の状態を維持したまま分子を気相中にサンプリングする方法に指針を与える結果が得られた。また、気相中に分子をサンプリングした際の構造変換が、水分子などの触媒的なはたらきによるものであることが解明された。

研究成果の概要(英文)：An existing cold ion trap mass spectrometer was modified and a home-made desorption electrospray ionization (DESI) device was installed. The DESI technique was applied to a model sample, and the produced ion was trapped in the cold ion trap and its infrared spectrum was measured. Although only a structure stable in the gas phase was observed, it was found that a structure stable in solution could also be observed by changing the DESI conditions. The results of the investigation of the conditions that inhibit the conversion reaction to the stable structure in the gas phase revealed that water molecule in the gas phase acts as a catalyst for the conversion reaction, and the atmosphere in the DESI device must be precisely controlled in order to obtain information on the in situ state of the sample by DESI.

研究分野：物理化学

キーワード：コンフォメーション解析 質量分析イメージング DESI イオントラップ分光 質量分析

1. 研究開始当初の背景

現在、様々な分子イメージング技術が開発され、生命科学や材料科学の分野で強力な解析ツールとなっている。分子イメージングとはある特定の分子の空間分布をマッピングすることであり、物質輸送やナノ構造の空間的制御などを研究する上で不可欠な技術である。蛍光分子の導入や放射性同位体を用いる方法が一般的であるが、これらの方法ではトレースする分子を蛍光色素や放射性同位体でラベリングする必要があり、一種の染色法である。「非染色」で分子イメージングする方法には、例えば質量イメージングがあり、質量分析法により特定の分子量の分子の空間分布をマッピングする。この場合、分子量をプローブしているため、分子の種類(分子式)は特定できるが、分子の状態、例えば、電子状態やコンフォメーション(構造異性体)などを区別することは困難である。これらの情報を得るには分光測定が適しており、例えばラマン分光法を用いたラマンイメージングが実用化されている。分光イメージングでは、ある特定の波長の光を吸収する分子(ラマンイメージングの場合は特定の振動遷移を有する分子)を検出するが、その吸収がどの様な種類の分子に由来するかを推定できても、質量分析の様に分子式を特定することは困難である。従って、質量イメージングは分子量を精密に特定できる薬物の様な小分子の分布測定に、分光イメージングは分子の状態や構造に基づいた大くくりの分子の分布測定に適している。

しかし、近年の医薬品開発などの生化学の現場では、両者の長所を併せ持つイメージング技術が求められている。それは、例えば薬物分子が生体内でどこに運ばれたかと同時に、その分子がどの様に働いているか知る必要があるからである。現状ではそれを同時に調べることができないので、個別に調べられている。

2. 研究の目的

本研究は、質量イメージングと分光イメージングの長所を組み合わせることで、分子とその状態や構造を特定したイメージングを実現することを目的とする。分子の構造-コンフォメーションに注目すると、分子のコンフォメーションは、温度や化学的環境(pHや種々のイオン濃度など)の他、他の分子との相互作用などによっても変化する。例えば、特定の受容体と結合するシグナル分子に注目すれば、受容体と結合しているとき、他の分子と結合しているとき、あるいは結合していないときなどで異なるコンフォメーションをとる。従って、その様な情報を得ることができる分光法と質量イメージングを組み合わせることができれば、実用的には極めて画期的なイメージング技術が完成すると期待される。

3. 研究の方法

研究代表者は、エレクトロスプレー(ESI)質量分析法とレーザー分光法を組み合わせることで、分子量と分光情報を同時に計測できる方法を確立した[1]。この方法では、ESIにより溶液中からイオンを非破壊的に気相中に取り出し、これを極低温に冷却してコンフォメーションの揺らぎを凍結する。これに複数のレーザーを用いる多重共鳴分光法を適用すると、異なるコンフォメーションの分光スペクトルを分離測定できる。この技術を質量イメージングに組み合わせる。そのために、ESI・冷却イオントラップ・レーザー分光装置のESI部を脱離エレクトロスプレーイオン化(DESI: Desorption ElectroSpray Ionization)源に置き換える(図1)。DESIはアセトニトリルなどの適当な溶媒を微細なニードルからエレクトロスプレーし、イオンを試料に照射し、試料から2次イオンを脱離させる方法である。2次イオンを真空中に取り込み、質量分析しながら試料を2次元走査することで、質量イメージングが可能となる。DESIによって生成した2次イオンを四重極マスで質量分析し、注目している分子のイオンのみを冷却イオントラップに導入する。ここで、イオンは極低温に冷却され、コンフォメーションが凍結される。ここに波長可変紫外レーザーあるいは赤外レーザーを照射し、イオンのレーザー吸収に伴う光解離フラグメントを後段の飛行時間型マスで検出する。コンフォメーションの違いによりレーザーの吸収波長が異なるため、レーザー波長を選択することで、特定のコンフォメーションのイオンのみを解離させることができる。従って、その解離フラグメントを検出することで、特定のコンフォメーションの検出が可能となる。

ここで問題になるのが、分析対象から脱離する2次イオンのコンフォメーションが、脱離過程や冷却過程で保存されているのか?ということである。これまでの研究や既報によると、ESIで生成するイオンの構造は、多くの場合、溶液内の構造を保っており、それを冷却しても構造は保たれることが明らかとなってきた[2]。しかし、DESIの場合も同様であるかは検討する必要がある。そこで、実験で得られ

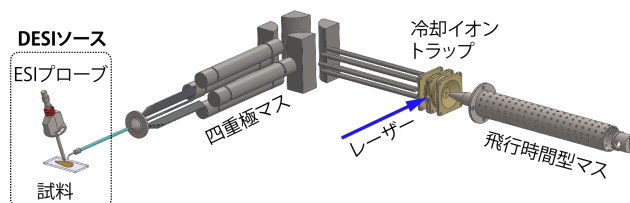


図1 コンフォメーションイメージング装置

たコンフォメーション分布と溶液中および気相中での安定性から予測される分布を比較することで、DESI の過程でコンフォメーションが保存されているかを検証する。

4. 研究成果

1) 2次元走査型 DESI の製作

まず、既存の質量分析装置の ESI 部分を改造し、外部からイオンを取り込むためのノズルを装着できる様にした (図2)。イオンを大気中から真空中に導入するためのガラス・キャピラリー入口のメタル蒸着部にステンレス製キャップを被せ、ここに 1/16” のステンレスチューブを取り付けた。

続いて、顕微鏡ステージに DESI のイオン吹きつけノズルを装着したシステムを構築した (図3)。イオン吹きつけノズルは、現有の ESI イオン源に使用しているノズルをそのまま用いることとした。これだと DESI を実施した際に面分解能は期待できないが、実証実験には十分である。吹きつけ角度と試料までの距離を微調整できる様にした。顕微鏡ステージは PC 制御でき、質量分析と 2次元走査を同期して行える様になっている。

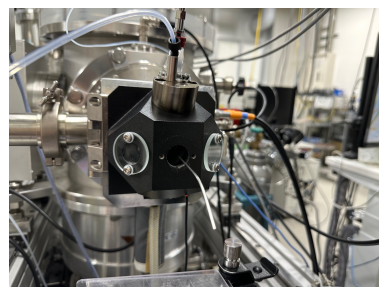


図2 イオン取り込み部の改造

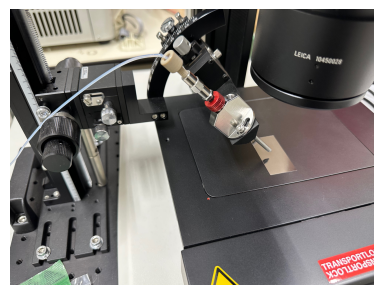
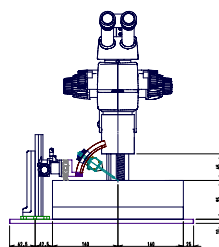


図3 DESI ノズル設計図 (左) と実物 (右)

2) DESI による分光測定

製作した装置を用いて、DESI によるイオン信号の確認と分光測定を行った。試料には μ -アミノ安息香酸 (PABA) を用いた。この分子はアミノ基とカルボキシ基をもち、両者ともプロトン付加可能なため、1プロトン付加体としては、2種類のプロトン付加位置の異なる異性体 (プロトマー) が存在する。それぞれを N-プロトマー、O-プロトマーと呼ぶ。溶液中では N-プロトマーが、気相中では O-プロトマーが安定なため、DESI により溶液中での構造が観測されるかを検討するのに利用できる。カバー・ガラスに PABA のメタノール溶液をエアブラシで均一に塗布し、乾燥後に DESI 装置に装着して実験を行った。DESI 用の溶液には 0.5% のギ酸を添加したメタノールを用いた。

試料の一箇所にスプレーを当て続けると試料が枯渇するので、ステージを移動させながらプロトン付加 PABA (PABA^+) の信号を確認した。次に、プロトマーを同定するために、冷却イオントラップで捕捉・冷却したイオンの赤外スペクトルを測定した。赤外スペクトルの測定法は以下の通りである。まず、冷却イオントラップに水素ガスを導入し、 PABA^+ に H_2 を付加する。 H_2 の結合エネルギーは小さいが ($\sim 500 \text{ cm}^{-1}$)、極低温に冷却しているために、簡単に水素クラスターが生成する。ここに、波長可変赤外レーザーを照射し、波長掃引する (図4)。水素クラスターが赤外光を吸収し振動励起されると、 H_2 が解離して PABA^+ が生成する。これを後段の飛行時間型マスで検出する (図1参照)。従って、 PABA^+ のイオン量をモニターしながら赤外レーザーを波長掃引することで、赤外スペクトルに相当する赤外光解離 (IRPD) スペクトルが得られる。これは厳密には PABA^+ の水素クラスターの赤外スペクトルであるが、水素分子の結合が弱く、 PABA^+ に与える摂動は小さいため、ほぼ PABA^+ の赤外スペクトルとみなせる。

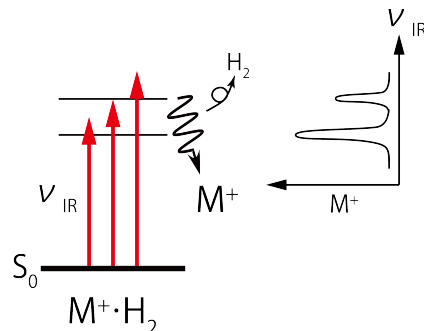


図4 水素分子を用いた光解離赤外分光法の原理

図5aに DESI によって生成した PABA^+ の IRPD スペクトルを示す。量子化学計算で得られたそれぞれのプロトマーの計算赤外スペクトルも合わせて示す (図5c, d)。計算との比較から、観測されているのは明らかに O-プロトマーのみであることが分かる。上に述べたように、溶液中では N-プロトマーのみが存在しているので、この結果は N-プロトマーが気相中で O-プロトマーに変換されたことを示唆している。つまり、試料中の状態がどうであれ、DESI の過程で、気相中で安定な構造に変換されてしまうため、試料の状態を知ることができないということになる。

PABA^+ のプロトマーの研究は他のグループも取り上げており、イェール大の Johnson のグループによると、ESI の溶液をアセトニトリルにすると N-プロトマーが強く観測されることが報告されている [3]。そこで、DESI で吹き付ける溶液をメタノール・アセトニトリル 1:1 の混合溶液 (0.5% ギ酸含む) に変えてみたところ、N-プロトマーが観測されるようになった (図5b)。しかし、依然として O-プロトマーが強く観測されており、やはり N \rightarrow O のプロトマー変換が起こっている。そこで、なるべく N-プロトマーだけが観測される条件を検討したのだが、困ったことに、再現性が取れないことが分かった。

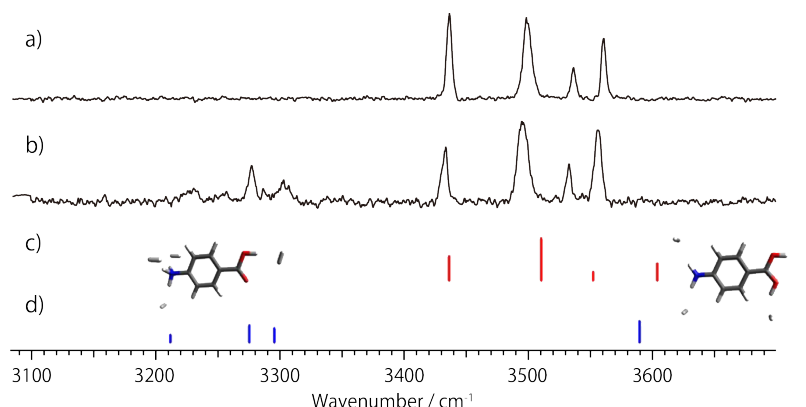


図5 a)メタノール噴霧およびb)アセトニトリル噴霧による DESI で生成した PABAH⁺の IRPD スペクトルと量子化学計算で得られた c)O-プロトマーと d)N-プロトマーの赤外スペクトル

3) イオン取り込み過程での構造変換

本研究では、イオン取り込み過程での構造変換を抑制する必要があるが、DESI で吹き付ける溶媒の種類が重要な要素であることは間違いないものの、再現性が取れないということは、まだ制御しきれていない条件があるということである。また、そもそも、なぜ溶媒を変えるとイオン取り込み過程での構造変換を抑制することができるのかもよく分かっていない。これを検討するためには、イオン取り込み部の雰囲気を精密に制御する必要があるが、図3に示した様に、DESI 及びイオン取り込み部は完全にオープンな構造になっているため、雰囲気の精密な制御は困難である。そこで、通常の ESI に戻して実験することにした。ESI の場合、イオン取り込み部は密閉系になっているため(図2の黒色のカバーで覆われた部分)、雰囲気の制御が可能である。

まず、ESI を用いた場合にプロトマーの溶媒依存性が見られるかを検証した。メタノールを用いた場合(図6a)は、DESI の場合には O-プロトマーのみ観測されていたが、今回は N-プロトマーも観測されている。また、アセトニトリルを用いると DESI の場合より ESI の方が N-プロトマーが若干強く観測されている(図6b)。しかし、ESI の場合でもやはり相対強度については測定する日によって異なり、再現性が取れないことが分かった。

種々検討したところ、湿度が低い日の測定では N-プロトマーが強く観測される傾向にあることが分かった。ESI 部には加熱窒素ガスを流しているが、窒素ガスは窒素ガス発生装置から供給しており、実験室の空気に由来する水蒸気が窒素ガスに含まれているのが原因ではないかと考えた。そこで、水蒸気を完全除去するのは困難なので、逆に水蒸気を飽和させた窒素ガス(水をバブリング)を用いた場合にどうなるかを検討した。すると、メタノール溶液による水蒸気を飽和させない通常条件下で N-プロトマーも観測されている場合に、水蒸気を飽和させると N-プロトマーが消失し、O-プロトマーのみとなった(図6c)。この結果から、ESI 雰囲気の水蒸気がプロトマー変換に関わっていることが明らかとなった。プロトマー変換にはプロトン移動反応が必要で、水分子が触媒の役割を果たしていることが予想される。この様に考えると、プロトマー分布の溶媒依存性についても説明できる。つまり、メタノールを用いた場合は、雰囲気に存在するメタノール分子が水と同様にプロトン移動反応の触媒となるのに対して、非プロトン性溶媒であるアセトニトリルの場合には、雰囲気に存在するアセトニトリル分子が触媒として機能しないため、溶液中でのプロトマー分布が気相中でも保存していると考えられる。アセトニトリル溶液でも O-プロトマーが観測されるが、これはおそらく加熱窒素ガス中に水分子が含まれているためだと考えられ、実際に、アセトニトリルをバブリングした窒素ガスを用いると、O-プロトマーがほとんど消失した(図6d)。つまり、溶液中の構造を保ったまま気相中で観測できるということが実証できたことになる。

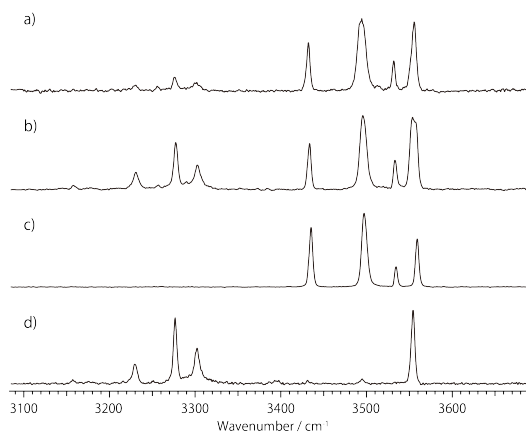


図6 a)メタノール溶液、b)アセトニトリル溶液の通常窒素雰囲気下 ESI、c)メタノール溶液の水蒸気飽和窒素雰囲気下 ESI、d)アセトニトリル溶液のアセトニトリル蒸気飽和窒素雰囲気下 ESI で生成した PABAH⁺の IRPD スペクトル

4) 将来展望

イオンを取り出した雰囲気制御は非常に重要であることが分かった。雰囲気の大部分はESIあるいはDESIに用いた溶媒の蒸気が占めているが、湿度の制御は必須である。現状のDESIは密閉系ではないため、残念ながら雰囲気制御は困難であり、そのため、イオンを気相中に取り出す前の状態を議論することが困難になっている。市販のDESIユニットはほとんどが密閉系になっており、もちろん細心の注意は必要であるが、雰囲気制御はやりやすくなっている。このような装置を用いれば、上述のように溶液中の構造を保ったまま気相中で観測できるので、当初の目的の通り、DESIで表面にある分子の構造を調べることができると考えられる。

本研究を通じて、分子内のプロトン移動反応において水やメタノール分子で触媒になることが明らかとなった。これは本研究の目的とは異なるためここでは詳しく述べないが、基礎科学的には非常に興味深い現象であり、今後、このメカニズムの解明を目指している[4]。

参考文献

- [1] S. Ishiuchi, H. Wako, D. Kato, M. Fujii, *J. Mol. Spectrosc.* 332 (2017) 45.
- [2] H. Wako, S. Ishiuchi, D. Kato, G. Feraud, C. Dedonder-Lardeux, C. Jouvet, M. Fujii, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (2017) 10777.
- [3] T. Khuu, N. Yang, M.A. Johnson, *Int. J. Mass Spectrom.* 457 (2020) 116427.
- [4] K. Akasaka, K. Hirata, F. Haddad, O. Dopfer, S. Ishiuchi, M. Fujii, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25 (2023) 4481.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 8件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Suzuki Yukina, Hirata Keisuke, Lisy James M., Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki	4. 巻 125
2. 論文標題 Double Ion Trap Laser Spectroscopy of Alkali Metal Ion Complexes with a Partial Peptide of the Selectivity Filter in K ⁺ Channels Temperature Effect and Barrier for Conformational Conversions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 9609 ~ 9618
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c06440	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Takeda Naoya, Hirata Keisuke, Tsuruta Kazuya, Santis Garrett D., Xantheas Sotiris S., Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki	4. 巻 24
2. 論文標題 Gas phase protonated nicotine is a mixture of pyridine- and pyrrolidine-protonated conformers: implications for its native structure in the nicotinic acetylcholine receptor	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 5786 ~ 5793
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp05175j	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Hirata Keisuke, Kasai Ken-ichi, Gregoire Gilles, Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki	4. 巻 155
2. 論文標題 Hydration-controlled excited-state relaxation in protonated dopamine studied by cryogenic ion spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 151101 ~ 151101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0066919	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する
1. 著者名 Negoro Takumi, Hirata Keisuke, Lisy James M., Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki	4. 巻 -
2. 論文標題 Potassium and sodium ion complexes with a partial peptide of the selectivity filter in K ⁺ channels studied by cold ion trap infrared spectroscopy: the effect of hydration	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP00936B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Sato Eiko, Hirata Keisuke, Lisy James M., Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki	4. 巻 12
2. 論文標題 Rethinking Ion Transport by Ionophores: Experimental and Computational Investigation of Single Water Hydration in Valinomycin-K ⁺ Complexes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1754 ~ 1758
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c03372	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Otsuka Remina, Hirata Keisuke, Yuta Sasaki, Lisy James M., Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki	4. 巻 21
2. 論文標題 Alkali and Alkaline Earth Metal Ions Complexes with a Partial Peptide of the Selectivity Filter in K ⁺ Channels Studied by a Cold Ion Trap Infrared Spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemphyschem	6. 最初と最後の頁 712-724
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.202000033	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ishiuchi Shun-ichi, Kamigori Junko, Tsuji Norihiro, Sakai Makoto, Miyazaki Mitsuhiko, Dedonder Claude, Juvet Christophe, Fujii Masaaki	4. 巻 22
2. 論文標題 Excited state hydrogen transfer dynamics in phenol-(NH ₃) ₂ studied by picosecond UV-near IR-UV time-resolved spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry and Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 5740-5748
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cp06369b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ishiuchi Shun-ichi, Wako Hiromichi, Xanthes Sotiris S., Fujii Masaaki	4. 巻 217
2. 論文標題 Probing the selectivity of Li ⁺ and Na ⁺ cations on noradrenaline at the molecular level	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Faraday Discussions	6. 最初と最後の頁 396-413
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8FD00186C	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計24件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 赤阪恭汰, Haddad Fuad, Dopfer Otto, 佐野晃, 石川春樹, 平田圭祐, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 プロトン付加p-アミノ安息香酸水和クラスターの冷却イオントラップ分光-水和によるプロトマースイッチ
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高柳光, 平田圭祐, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 カルボン酸-マグネシウムは何個の水分子で電離するか?-水和クラスターの冷却イオントラップ分光
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉沢幸毅, 平田圭祐, 石内俊一, Anne Zehnacker-Rentine, 藤井正明
2. 発表標題 LLおよびLDシクロジチロシンの冷却イオントラップ分光-プロトン・アルカリ金属イオン付加と光学異性
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木雪菜, 平田圭祐, J. M. Lisy, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 K ⁺ チャネル選択フィルター部分ペプチド-アルカリ金属イオン錯体水和クラスターの冷却トラップ分光 - イオン選択性に対する水和効果
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武田直哉, 平田圭祐, 石内俊一, S. Xantheas, 藤井正明
2. 発表標題 プロトン付加ニコチン水和クラスターのエレクトロスプレー・冷却イオントラップ分光 - プロトン移動と同位体効果
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田邊悟, 平田圭祐, 石内俊一, 築山光一, 藤井正明
2. 発表標題 K ⁺ チャンネル選択フィルター部分ペプチド (GYG) - 金属錯体の冷却イオントラップ赤外分光 - Ag ⁺ の特異性
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大古拓弥, 花市峻咲, 平田圭祐, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 アドレナリン受容体部分ペプチド - リガンド複合体の冷却イオン分光 - 分子認識のアミノ酸配列依存性
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 千葉大雅, 角田瑠輝, 平田圭祐, 石内俊一, 吉沢道人, 築山光一, 藤井正明
2. 発表標題 分子認識する芳香環カプセルの冷却イオン赤外分光 - 性ホルモン認識メカニズム
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平田圭祐, Haddad Fuad, Dopfer Otto, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 プロトン化ベンゾカインす岩倉アスターの冷却イオントラップ赤外分光 - 水和による分子ないプロトン移動
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石内俊一
2. 発表標題 Hydration effect on Mg ²⁺ channel studied by cryogenic ion trap spectroscopy
3. 学会等名 PACIFICHEM2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三井聡一郎, 平田 圭祐, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 分子動力学法と量子化学計算を用いたプロトン付加ノルアドレナリン水和クラスター配座異性体の網羅的探索
3. 学会等名 分子科学オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 森優太, 平田圭祐, 石内俊一, 藤井 正明, Anne Zeunacker-Reutien
2. 発表標題 冷却イオン分光法によるシクロデキストリン包接錯体の気相分光-キラル選択性 の解明
3. 学会等名 分子科学オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大古拓弥, 田端みずき, James Lisý, 吉森篤史, 中野洋文, 平田圭祐, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 天然変性タンパク質 シヌクレイン部分ペプチド-リガンド複合体の冷却イオン 分光 -リガンド結合によって誘起される二次構造の探索
3. 学会等名 分子科学オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 武田直也, 窪田知弥, 平田圭祐, 石内俊一, Sotiris Xantheas, 藤井正明
2. 発表標題 プロトン付加ノルニコチン水和クラスターのエレクトロスプレー・冷却イオン トラップ分光 -プロトン付加位置に対する水和効果
3. 学会等名 2020年日本分光学会年次講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高柳光, 平田圭祐, 石内俊一, 藤井正明
2. 発表標題 カルボン酸-マグネシウム水和クラスターの冷却イオントラップ赤外分光 -何個の水分子で電離するか?
3. 学会等名 2020年日本分光学会年次講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ishiuchi Shun-ichi
2. 発表標題 Cold Ion Trap Spectroscopy for Molecular Recognition Systems
3. 学会等名 Gordon Research Conferences "Molecular and Ionic Clusters" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 笠井賢一、平田圭祐、石内俊一、藤井正明
2. 発表標題 プロトン付加ドーパミン水和クラスターの冷却イオントラップ分光-励起状態緩和に対する水和効果
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤映虹、平田圭祐、石内俊一、藤井正明
2. 発表標題 冷却イオントラップ法によるパリノマイシン-アルカリ金属イオン水和クラスターの赤外分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田村将人、大古拓弥、森優太、関口翼、平田圭祐、石川春樹、石内俊一、藤井正明
2. 発表標題 アドレナリン受容体部分ペプチド・リガンド錯体の冷却イオントラップ分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田端みずき、吉森篤史、中野洋文、平田圭祐、石内俊一、藤井正明
2. 発表標題 天然変性タンパク質 シヌクレイン部分ペプチド-低分子リガンド複合体の冷却イオントラップ分光-リガンド結合による二次構造誘起
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 三井聡一郎、加賀屋舜、石内俊一、藤井正明、平田圭祐
2. 発表標題 プロトン付加アドレナリン水和クラスターの冷却イオントラップ分光 -コンフォメーションに対する水和効果
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大塚玲美奈、平田圭祐、Lisy James M.、石内俊一、藤井正明
2. 発表標題 カリウムイオンチャンネル選択フィルター部分ペプチド-アルカリ土類金属錯体の冷却イオントラップ赤外分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 根来拓己、石内俊一、Lisy James M.、平田圭祐、藤井正明、福井義光
2. 発表標題 カリウムイオンチャンネル選択フィルター部分ペプチド-アルカリ金属錯体の冷却イオントラップ分光-錯形成に対する水和効果
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平田圭祐、高柳光、武田直也、石内俊一、築山光一、藤井正明
2. 発表標題 カルボン酸-アルカリ土類金属クラスターの冷却イオントラップ分光-電離過程に対する水和効果
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------