

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 6 日現在

機関番号：17201

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26410017

研究課題名(和文)近赤外ラマン円偏光二色性分光法を用いて光受容タンパク質中間体の構造を明らかにする

研究課題名(英文)Applications of Near-Infrared Raman Optical Activity to Photoreceptor Proteins

研究代表者

海野 雅司(Unno, Masashi)

佐賀大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：50255428

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究の大きな目的は申請者らが開発してきたラマン円偏光二色性分光装置の更なる高感度化と、生命科学における重要課題への適用である。本手法は円二色性分光(いわゆるCD)のラマン分光版で、通常のラマン分光に比べて極めて多くの構造情報を提供する。特に溶液中では平面構造の分子がタンパク質中ではキラルな非平面構造になることに注目し、活性中心である補欠分子の構造的な歪みを検出できることを示してきた。特に、本研究では分子動力学計算と量子化学計算を用いたスペクトル解析法を確立することができた。また光受容タンパク質の応用に関しては、その励起波長依存性に関して顕著な成果を得ることができた。

研究成果の概要(英文)：Many biological cofactors, such as light-absorbing chromophores in photoreceptors, are intrinsically planar molecules. A protein environment, however, causes structural distortions of the cofactor, and such structural changes can lead to a modulation of chemical properties of the cofactor to maximize its biological activity. In this project, we have established the spectral analysis of Raman optical activity (ROA) based on quantum chemical calculations combined with molecular dynamics simulations. For an application of ROA to photoreceptor proteins, we have examined the effect of excitation wavelength on the ROA spectra for the first time.

研究分野：分子分光学

キーワード：振動分光 生物物理 光受容タンパク質 量子化学計算

## 1. 研究開始当初の背景

自然界には補欠分子を活性中心としてもつ色素タンパク質が数多く存在する。例えばヘムタンパク質はさまざまな機能を発現するため鉄ポルフィン錯体であるヘムを活性部位としてもっている。また光受容タンパク質では発色団と呼ばれる有機化合物を光の検出に使っており、光吸収によって引き起こされた発色団の構造変化がタンパク質の構造変化を引き起こして信号伝達などの機能を実現している。このような補欠分子の多くは $\pi$ 電子系を有した化合物で、本来は平面構造である。しかし、タンパク質中では歪んだ非平面構造となり、この構造の歪みがタンパク質の機能と密接な関係をもつことが示されてきた。例えば、光受容タンパク質では発色団の吸収波長制御や光物理・光化学的な性質などに関与していることが示されている。

上記のように補欠分子の構造歪みの重要性は指摘されてきたが、その実験的な検出は容易ではない。例えば、X線結晶回折では1.5 Å程度の高分解能構造でも正確に面外方向の歪みを検出することはできない。そこで我々は非平面構造への歪みに関する構造情報が期待できる分光手段として、ラマン円偏光二色性分光またはラマン光学活性分光 (Raman Optical Activity, ROA) と呼ばれる手法に注目した。ROAは右回りと左回りに円偏光したレーザー光を照射した際に観測されるラマン散乱光の強度差  $I^R - I^L$  で、鏡像異性体ではその符号が反転する性質を用いたキラル分光の一つである。紫外可視光を用いた電子円二色性分光 (いわゆる CD) に比べて ROA スペクトルでは多くの振動バンドから構成されており、個々のバンドが有益な構造マーカーとなり得るのが大きな利点である。このため ROA は蛋白質や糖鎖などのさまざまな生体関連分子に応用されてきた。しかし、従来開発されてきた ROA 分光装置のほとんどは可視レーザー光を励起光源として用いているため、多くの色素タンパク質では蛍光や試料の光損傷などのため応用できなかった。そこで我々は近赤外励起の ROA 分光装置を開発し、タンパク質中に存在する発色団の ROA スペクトルを選択的／優先的に測定できることを明らかにしてきた。

## 2. 研究の目的

本研究の大きな目的は申請者らが開発してきた近赤外ラマン円偏光二色性分光法の高感度化と、実際に本手法を用いて生命科学における重要課題を解決していくことである。この目的を達成するため、本研究ではつぎの3つの目的を設定した。(1) 装置の高感度化：我々は近赤外ラマン円偏光二色性分光装置を開発し、従来では測定できなかった色素分子などへの応用を可能にした。しかし、短寿命化学種に適用するためには更なる測定感度の向上が必要であり、本研究の第一の目的とした。(2) 解析法の確立：観測デー

タから分子構造に関する情報を得るためには量子化学計算によるスペクトル予測が必須である。本手法によりどの程度の精度で構造を予測できるのかを評価し、新しい構造解析法としての確立を目指す。(3) 光反応中間体などへの応用：装置開発と平行して、生体関連分子やナノ材料への応用実験を行う。特に本研究では光受容タンパク質の反応中間体への応用を目指す。我々が近赤外ラマン円偏光二色性スペクトルを測定できる世界中で唯一の研究グループであるという利点を活かし、生命科学における重要課題の解決を目的とした。

## 3. 研究の方法

分子にエネルギー  $h\nu_L$  ( $\nu_L$  は振動数) の光を照射すると散乱光の一部はエネルギーを変えて振動数 ( $\nu_S$ ) のラマン散乱光となる。このとき、入射光 ( $\nu_L$ ) と散乱光 ( $\nu_S$ ) の振動数の差  $\nu_L - \nu_S$  が分子固有の振動数に対応する。従って試料に照射したレーザー光からのラマン散乱光を観測し、その振動数と強度を調べることで分子振動に関する知見が得られる。

ROA では入射光として右回りおよび左回りに円偏光したレーザー光を用いてラマン散乱光を観測する。これらの和  $I^R + I^L$  は通常のラマンスペクトルに対応するが、これらの差  $I^R - I^L$  が ROA スペクトルとなる。キラルでない分子では  $I^R - I^L = 0$  となるが、キラルな分子では  $I^R$  と  $I^L$  の強度がわずかに異なり  $I^R - I^L \neq 0$  となる。ところが ROA 信号  $I^R - I^L$  はラマン信号強度  $I^R + I^L$  の  $10^{-3}$  以下と極めて小さく、その測定は容易ではない。しかし鏡像異性体では ROA スペクトルの符号が反転して区別でき、生体関連分子の多くはキラルであることから通常のラマン分光よりも高次の構造情報が期待できる。本研究では、まず我々が開発した近赤外ラマン円偏光二色性分光装置の更なる高感度化に取り組んだ。従来の装置では入射光を左右円偏光に変調して測定したラマン散乱光を観測し、その差  $I^R - I^L$  から得ることができる。この方法は入射円偏光方式 (Incident Circular Polarization, ICP) と呼ばれる。一方、無偏光の入射光を照射して観測されるラマン散乱光の左右円偏光の強度差を観測する散乱円偏光方式 (Scattered Circular Polarization, SCP)

でも同様の ROA スペクトルが得られることがわかっている。この方式では左右円偏光成分を同時観測するため、レーザー光の出力や発振波長の揺らぎの影響を受けずにラマン円偏光二色性スペクトルを観測可能だと期待できる。ROA スペクトルには分子構造に関するさまざまな情報が含まれている。しかし、得られたスペクトルから構造情報を引き出すためには、量子化学計算による ROA スペクトルのシミュレーションが必要である。本研究では分子動力学計算 (MD 計算) も併用した解析法の確立をめざした。本研究の最大の目

的である受容タンパク質の光反応中間体へ応用すると同時に、ヘムタンパク質などの生体関連分子への応用研究に取り組んだ。

#### 4. 研究成果

我々は 532 nm 励起と 785 nm 励起の 2 台の ROA 分光装置を用い、小分子ペプチドや光受容タンパク質などへの応用を試みた。また SCP 方式の近赤外励起ラマン円偏光二色性分光計の開発にも成功した。

解析方法の開発に関しては、小分子ペプチドについて検討した。具体的な研究対象としては環状ジペプチド cyclo(L-Ala-Gly) とテトラアラニン Ala<sub>4</sub> を用い、ラマンおよび ROA スペクトルの測定を行った。測定は軽水に溶かした試料だけでなく、重水に溶かした試料についても行った。観測したラマンおよび ROA スペクトルを解析するため、密度汎関数理論 (Density Functional Theory, DFT) に基づいた理論計算によるスペクトルのシミュレーションを行った。また水溶液中における分子構造の揺らぎや溶媒である水分子との水素結合などの効果を考慮するため、分子動力学 (Molecular Dynamics, MD) 計算を行った。cyclo(L-Ala-Gly) の場合、MD 計算には Amber11 を用い、溶質分子の周りに 486 個の水分子を配置した系について 300 K での MD 計算を 12.8 ns 行った。得られたトラジェクトリーから 250 個のスナップショットを取り出し、溶質分子は量子力学的に計算し (QM)、水分子は分子力学 (MM) で取り扱う QM/MM 計算の初期構造とした。QM/MM 計算では水分子の数を 100 個に減らし、水分子の座標は固定したまま、溶質分子のみを構造最適化した。250 個の最適化構造についてスペクトルを計算し、平均化することで水溶液試料のラマンおよび ROA スペクトルを得た。計算スペクトルは実測スペクトルをよく再現し、特に ROA スペクトルの解析には極めて有効であることがわかった。実測スペクトルと計算スペクトルの良い一致は Ala<sub>4</sub> についても得られた。ROA スペクトルでは、比較的小さなコンフォメーションの違いで符号が反転し、多くの ROA バンドが互いに打ち消しあっていることが再現された。このように ROA スペクトルの測定と MD+QM/MM 法によるスペクトル解析を行うことで、分子の動的構造に関する知見も得られることがわかった。

ROA 分光の光受容タンパク質への応用に関しては、励起波長依存性に関して大きな進展があった。共鳴条件下で ROA 測定を行えば、共鳴ラマン散乱と同様に低濃度試料でも高感度に分子の ROA スペクトルが計測できると期待される。しかし、共鳴条件では ROA スペクトルの形状は共鳴ラマンスペクトルと同一になり、またその強度は共鳴する電子遷移の円二色性と比例関係を持つというのが理論からの予測である。つまり、共鳴 ROA スペクトルは ECD スペクトル以上の立体構造情報を持たないと考えられてきた。1 つの電子励

起状態のみを考慮した近似 (単一励起状態近似) の下で 1996 年に導出されたこの理論予測は、*Salinibacter ruber* 由来 Photoactive Yellow Protein (PYP) の ROA スペクトルの励起波長依存性によって確かめられた。我々は PYP の ROA スペクトルを 785 nm と 532 nm の 2 つの励起波長を用いて測定した。例えば 984 と 831 cm<sup>-1</sup> に位置する C-H 面外変角モード ( $\gamma_8$ ,  $\gamma_2$ ) が顕著に強い ROA 強度を示し、その ROA スペクトルの形状はラマンスペクトルとは異なる。しかし、PYP の電子遷移に近い 532 nm の励起波長を用いると、ROA スペクトルはちょうどラマンスペクトルを上下反転させたものと酷似した。つまり理論の予測を裏付けるように、共鳴条件下では ROA スペクトルの強度パターンが通常のラマンスペクトルと一致した。また ROA スペクトルとラマンスペクトルの強度比 ( $3.1 \times 10^{-4}$ ) は吸光係数と円二色性の強度比 ( $6.8 \times 10^{-4}$ ) の約半分となって、これも理論の予測とよく合っている。ROA 測定では、レーザー波長に応じて波長板等の光学素子のほぼ全てを換えて調整する必要があるため、ROA スペクトルに対するこのような励起波長依存性の実験はほぼ皆無であった。可視光と近赤外光の 2 波長を用いた ROA 測定によって、振動バンドごとに固有の符号と強度を持つ PYP の ROA スペクトルの特徴が共鳴条件下で失われることがわかった。特に色素の ROA スペクトル測定においては励起波長の選択が重要になることが明らかとなった。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 11 件)

(1) Kajimoto, K, Kikukawa, T., Nakashima, H., Yamaryo, H., Saito, Y., Fujisawa, T., Demura, M., Unno, M. Transient resonance Raman spectroscopy of a light-driven sodium-ion-pump rhodopsin from *Indibacter alkaliphilus*, 査読有, *J. Phys. Chem. B* 121, 4431-4437 (2017).

DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b02421

(2) 松尾英之、海野雅司, ラマン分光法の有田焼評価への活用, 査読無, *セラミックス* 51, 550-552 (2016)

(3) 藤澤知績、海野雅司, ラマン光学活性分光法, 査読有, *分光研究* 65, 218-231 (2016).

(4) Furuta, M., Fujisawa, T., Urago, H., Eguchi, T., Shingae, T., Takahashi, S., Blanch, E. W., Unno, M. Raman optical activity of tetra-alanine in the poly(L-proline) II type peptide conformation, 査読有, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19, 2078-2086

(2016). DOI: 10.1039/C6CP07828A

(5) Haraguchi, S., Hara, M. Shingae, T., Kumauchi, M., Hoff, W. D., Unno, M. Experimental detection of the intrinsic difference in Raman optical activity of a photoreceptor protein under preresonance and resonance conditions, 査読有, *Angew. Chem. Int. Ed.* 54, 11555-11558 (2015). DOI: 10.1002/anie.201505466

(6) Kimura, Y., Kasuga, S., Unno, M., Furusawa, T., Osoegawa, S., Sasaki, Y., Ohno, T., Wang-Otomo, Z.-Y. The roles of C-terminal residues on the thermal stability and local heme environment of cytochrome c' from the thermophilic purple sulfur bacterium *Thermochromatium tepidum*, 査読有, *Photosynth. Res.* 124, 19-29 (2015). DOI:10.1007/s11120-014-0069-6

(7) Zhao, W., Kirie, H., Tanaka, A., Unno, M., Yamamoto, S., Noguchi, H. Synthesis of metal ion substituted P2-Na<sub>2/3</sub>Ni<sub>1/3</sub>Mn<sub>2/3</sub>O<sub>2</sub> cathode material with enhanced performance for Na ion batteries, 査読有, *Mater. Lett.* 135, 131-134 (2014). DOI:10.1016/j.matlet.2014.07.153

(8) Zhao, W., Tanaka, A., Tanaka, A., Unno, M., Yamamoto, S., Noguchi, H. Synthesis of LiNi<sub>1/3</sub>Mn<sub>2/3</sub>O<sub>2</sub> related cathode material from P2-Na<sub>2/3</sub>Ni<sub>1/3</sub>Mn<sub>2/3</sub>O<sub>2</sub> for lithium ion battery, 査読有, *Mater. Lett.* 134, 206-209 (2014). DOI:10.1016/j.matlet.2014.07.042

(9) Zhao, W., Kido, G., Harada, S. Unno, M., Noguchi, H. Synthesis and characterization of anisotropically expanded graphite oxide compounds derived from spherical graphite, 査読有, *J. Colloid Interface Sci.* 431, 8-16 (2014). DOI:10.1016/j.jcis.2014.06.018

(10) Furuya, Y., Zhao, W., Unno, M., Noguchi, H. The electrochemical properties of low-crystallinity TiO<sub>2</sub>(B)-carbon composite as an anode material in lithium-ion battery, 査読有, *Electrochim. Acta* 136, 266-273 (2014). DOI:10.1016/j.electacta.2014.05.107

(11) Urago, H., Suga, T., Hirata, T., Kodama, H., Unno, M. Raman optical activity of a cyclic dipeptide analyzed by quantum chemical calculations combined with molecular dynamics simulations, 査読有, *J. Phys. Chem. B* 118, 6767-6774

(2014).

DOI: 10.1021/jp503874z

[学会発表] (計 3 4 件)

(1) 日本化学会 第 97 春季年会 (2017), 日吉, 2017.3.16, ポスター, Searching for anharmonic low frequency mode in green fluorescent protein, Fujisawa, T., Unno, M.

(2) 日本化学会 第 97 春季年会 (2017), 日吉, 2017.3.17, 口頭, Assignment of Raman optical activity spectra of photoactive yellow protein by isotopic labeling, Haraguchi, S., Shingae, T., Kasai, N., Kumauchi, M., Fujisawa, T., Hanamoto, T., Hoff, W. D., Unno, M.

(3) 日本化学会 第 97 春季年会 (2017), 日吉, 2017.3.17, 口頭, 紫外共鳴ラマン分光法を用いたシアノバクテリオクロム RcaE の光変換機構の解明, 渡邊亘平、小副川晋介、広瀬侑、藤澤知績、池内昌彦、海野雅司

(4) The 11th Saga University-Daegu University Joint Symposium, Saga, 2016.11.1, poster, Low temperature Raman/ROA measurement of photoreceptor protein, Abe, M., Fujisawa, T., Kikukawa, T., Unno, M.

(5) The 11th Saga University-Daegu University Joint Symposium, Saga, 2016.11.1, poster, Analysis of Arita porcelain by micro-Raman spectroscopy, Kamura, S., Matsuo, H., Watari, T., Unno, M.

(6) The 11th Saga University-Daegu University Joint Symposium, Saga, 2016.11.1, poster, Photoconversion mechanism of cyanobacteriochrome RcaE studied by ultraviolet resonance Raman spectroscopy, Watanabe, K., Osoegawa, S., Hirose, Y., Fujisawa, T., Ikeuchi, M., Unno, M.

(7) 第 54 回日本生物物理学会年会, つくば, 2016.11.27, poster, Chromophore conformation in active site of orange carotenoid protein from Raman optical activity spectroscopy, Fujisawa, T., Unno, M., Leverenz, R. L., Kerfeld, C. A.

(8) 第 54 回日本生物物理学会年会, つくば, 2016.11.25, poster, Analysis of a hydrogen bonding network of the BLUF domain using isotope-labeled samples (同位体標識試料を用いた BLUF ドメインの水素結合環境の解明), Nagai, T., Iwata, T., Ito, S., Iseki,

M., Watanabe, M., Unno, M., Kitagawa, S., Kandori, H.

(9) Fifth International Conference on Vibrational Optical Activity, Antwerp (Belgium), 2016.9.11-16, Oral Presentations, Chromophore conformation in active site of orange carotenoid protein from Raman optical activity, Fujisawa, T., Leverenz, R. L., Kerfeld, C. A., Unno, M.

(10) Fifth International Conference on Vibrational Optical Activity, Antwerp (Belgium), 2016.9.11-16, Invited Presentation, Raman optical activity of photoreceptor proteins under pre-resonance and resonance conditions, Unno, M.

(11) 九重分子科学セミナー2016, 九重, 2016.9.2, 口頭, 紫外共鳴ラマン分光法によるシアノバクテリアオクロム RcaE の光変換機構の解析, 渡邊亘平、小副川晋介、広瀬 侑、藤澤知績、池内昌彦、海野雅司

(12) 九重分子科学セミナー2016, 九重, 2016.9.2, 口頭, Photoactive Yellow Protein 発色団の面外方向への歪みに敏感な C-H 面外変角振動モードの帰属, 原口翔次郎、新ヶ江貴仁、笠井紀貴、熊内雅人、藤澤知績、花本猛士、Wouter D. Hoff、海野雅司

(13) 第 43 回生体分子科学討論会, 名古屋, 2016.6.24, 口頭, ラマン光学活性に基づくオレンジカロテノイドタンパク質の活性部位における発色団の立体構造変化, 藤澤知績、Ryan L. Leverenz、Cheryl A. Kerfeld、海野雅司

(14) 第四回 分子設計研究会, 京都大学新・東京オフィス, 2016.6.11, 口頭, ラマン円偏光二色性分光を用いた色素タンパク質の構造解析, 海野雅司

(15) 日本化学会 第 96 春季年会 (2016), 田辺, 2016.3.27, 口頭, Experimental detection of the intrinsic difference in Raman optical activity of a photoreceptor protein under preresonance and resonance conditions, Haraguchi, S., Hara, M., Shingae, T., Kumauchu, M., Hoff, W. D., Unno, M.

(16) 日本化学会 第 96 春季年会 (2016), 田辺, 2016.3.25, poster, Chromophore conformation in active site of orange carotenoid protein studied by Raman optical activity spectroscopy, Fujisawa, T., Leverenz, R., Kerfeld, C., Unno, M.

(17) 第 54 回セラミックス基礎科学討論会, 佐賀, 2016.1.7-8, poster, ラマン分光法の有田焼への活用について, 渡孝則、海野雅司、嘉村翔太郎、○松尾英之

(18) The 6th Joint Seminar between Saga University and Liaoning University, Saga, 2015.12.10, poster, Evidence for the presence of K and L intermediates in proteorhodopsin revealed by transient resonance Raman spectroscopy, Yamaryo, H., Tajitsu, S., Tamogami, J., Fujisawa, T., Kamo, N., Unno, M.

(19) The 6th Joint Seminar between Saga University and Liaoning University, Saga, 2015.12.10, poster, Experimental detection of the intrinsic difference in Raman optical activity of a photoreceptor protein under pre-resonance and resonance conditions, Haraguchi, S., Hara, M., Shingae, T., Kumauchi, M., Hoff, W. D., Unno, M.

(20) 12th Annual Research Symposium in Biological Sciences, Oklahoma (USA), 2015.9.17, poster, Experimental detection of the intrinsic difference in Raman optical activity of a photoreceptor protein under pre-resonance and resonance conditions, Haraguchi, S., Hara, M., Shingae, T., Kumauchi, M., Hoff, W. D., Unno, M.

(21) 第 53 回日本生物物理学会年会, 金沢, 2015.9.13-15, 口頭, 過渡共鳴ラマン分光法を用いたプロテオロドプシン光反応初期中間体の解析, 山領春輝、田実真一、田母神淳、加茂直樹、海野雅司

(22) 15th International Conference on Chiroptical Spectroscopy, Sapporo, 2015.8.30-9.3, Invited Talk, Refinements of the Active Site Structures in Photoreceptor Proteins by Raman Optical Activity, Masashi Unno

(23) 九重分子科学セミナー2015, 九重, 2015.7.24, 口頭, 過渡共鳴ラマン分光法を用いたプロテオロドプシン初期中間体の解析, 山領春輝、田実真一、田母神淳、加茂直樹、海野雅司

(24) “Metals in Biology” in Wako, Wako, 2015.6.16-17, poster, Active Site Structures of Heme Proteins Studied by Raman Optical Activity, Shingaea, T., Unno, M.

(25) APS March Meeting 2015, Session J46: Invited Session: Physics of Proteins: Integrating Computation with Experiment, San Antonio, TX (USA), 2015.3.3, Invited Talk, Exploring the active site structure of photoreceptor proteins by Raman optical activity, Masashi Unno

(26) Departmental Seminar, Department of Biochemistry & Molecular Biology, Oklahoma State University Stillwater, OK (USA), 2015.2.27, Invited Talk, Near-Infrared Raman Optical Activity Probes the Active Site Structure of Photoreceptor Proteins, Masashi Unno

(27) The 9th Saga University-Daegu University Joint Seminar, Saga, 2014.11.17-19, poster, Near-Infrared Raman Optical Activity of Photoactive Yellow Protein with a Locked Chromophore Analogue Analyzed by Quantum Chemical Calculations and Molecular Dynamics Simulations, Haraguchi, S., Shingae, T., Kumauchi, M., Hoff, W. D., Unno, M.

(28) The 9th Saga University-Daegu University Joint Seminar, Saga, 2014.11.17-19, poster, Active Site Structure of Photoactive Yellow protein with a Locked Chromophore Analogue Revealed by Near-Infrared Raman Optical Activity, Shingae, T., Kubota, K., Foster, N. D., Kumauchi, M., Hoff, W. D., Unno, M.

(29) 第37回溶液化学シンポジウム, 佐賀, 2014.11.12-13, ポスター, 構造揺らぎを考慮して光受容タンパク質のラマン円偏光二色性スペクトルを解析する, 原口翔次郎, 古賀菜月, 新ヶ江貴仁, 熊内雅人, Wouter D. HOFF, 海野雅司

(30) 第37回溶液化学シンポジウム, 佐賀, 2014.11.12-13, 口頭, 分子動力学計算と量子化学計算を用いた環状ジペプチドのラマン円偏光二色性スペクトルの解析, 海野雅司, 浦郷寛康, 菅虎雄, 兒玉浩明

(31) Fourth International Conference on Vibrational Optical Activity, Baoding (China), 2014.10.26-29, poster, Near-Infrared Raman Optical Activity of Photoactive Yellow Protein with a Locked Chromophore Analogue Analyzed by Quantum Chemical Calculations and Molecular Dynamics Simulations, Haraguchi, S., Shingae, T., Kumauchi, M., Hoff, W. D., Unno, M.

(32) Fourth International Conference on

Vibrational Optical Activity, Baoding (China), 2014.10.26-29, poster, Active Site Structure of Photoactive Yellow protein with a Locked Chromophore Analogue Revealed by Near-Infrared Raman Optical Activity, Shingae, T., Kubota, K., Foster, N. D., Kumauchi, M., Hoff, W. D., Unno, M.

(33) Fourth International Conference on Vibrational Optical Activity, Baoding (China), 2014.10.26-29, Invited Talk, Raman Optical Activity of Peptides and Photoreceptor Proteins Analyzed by Quantum Chemical Calculations Combined with Molecular Dynamics Simulations, Masashi Unno

(34) 九重分光光学関連夏季セミナー2014、九重、2014.7.25-26、口頭、共鳴ラマン分光法によるシアノバクテリアオクローム RcaE 発色団のプロトン化状態の解明、○小副川晋介、広瀬 侑、池内昌彦、海野雅司

〔図書〕(計1件)

1) 海野雅司  
“共鳴ラマン分光法”  
「生命の辞典」pp. 350-351、朝倉書店 2016. 3

〔その他〕

ホームページ等  
<http://biophysics.chem.saga-u.ac.jp/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

海野 雅司 (UNNO, Masashi)  
佐賀大学・大学院工学系研究科・教授  
研究者番号：50255428

### (2) 研究分担者

### (3) 連携研究者

増田 真二 (MASUDA, Shinji)  
東京工業大学・バイオ研究基盤支援総合センター・准教授  
研究者番号：30373369

田母神 純 (TAMOGAMI, Jun)  
松山大学・薬学部・助教  
研究者番号：30580089

小松 直樹 (KOMATSU, Naoki)  
滋賀医科大学・医学部・准教授  
研究者番号：30253008