

令和 3 年 6 月 14 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H01938

研究課題名(和文)冷却イオン分光によるイオンチャネルのイオン選択性に対する水和効果の解明

研究課題名(英文) Hydration effect on ion-selectivity of ion channels studied by cold ion trap spectroscopy

研究代表者

石内 俊一 (Ishuchi, Shun-ichi)

東京工業大学・理学院化学系・教授

研究者番号：40338257

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：イオンチャネルのイオン選択性に対する水和効果を分子レベルで解明するために、イオン選択部位である選択フィルターの部分ペプチドの種々の金属イオン錯体の水和クラスターを真空中に生成し、極低温で赤外スペクトルを測定することで、それらの構造が水和によってどのように変化するかを調べた。これまで、単純にイオンが選択フィルターに結合すると水和されているのでどちらが安定かという視点でイオン選択性と水和の関係が述べられてきたが、本研究の結果、水和がイオン選択にもっと直接的に関わっているいくつかの例が明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、水和効果がイオンチャネルのイオン選択性に直接的かつ本質的な役割を果たしている可能性があることが示された。金属イオンの高い電荷密度は生体にとってタンパク質の高次構造を破壊する有害なものであり、水和は遮蔽効果により電荷を中和するのに役立っている。イオン選択過程においても、水和のそのような役割は不可欠であるが、それをうまく調整して利用することでイオン選択が達成できているらしい。本研究の結果は、イオンチャネルに関わる基礎的な生物学・化学だけでなく、超分子や創薬などの人工分子の設計にも資する知的基盤を提供するものと期待される。

研究成果の概要(英文)：To elucidate hydration effects on the ion selectivity of ion channels at molecular level, structural changes of metal ion complexes of a partial peptide which constitutes selectivity filter of the ion channel by hydration were investigated by using infrared spectroscopy measured under ultra cold isolated condition. So far, hydration effects upon the ion selectivity have been argued from the point of view of simple thermo dynamics; which is more stable, binding with the selectivity filter or hydration. In this work, however, it was revealed that the hydration effect affects the ion selectivity more directly and plays a crucial role for it in some case.

研究分野：物理化学，分子分光学

キーワード：イオンチャネル ペプチド 質量分析 レーザー分光法 赤外分光法 冷却イオン分光法

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

イオンチャンネルは細胞膜に埋まっているタンパク質で、特定のイオンを選択的に透過させることができ、細胞内の種々の金属イオン量を調節するためのバルブとして機能している。イオン量が増えると細胞の電位が変化するので、種々のシグナル伝達のための電気信号を発生させる、生体にとって必要不可欠なタンパク質である。イオンチャンネルの興味深い点は、どうやってイオンを選択しているか？ということである。例えば、カリウムイオンチャンネルでは、イオン半径が 1.51\AA の K^+ は透過するが、 1.16\AA の Na^+ は透過せず、その仕組みは単なる孔では説明できない(図1)。MacKinnonらはカリウムイオンチャンネル KcsA の結晶構造解析に成功し、選択フィルターと呼ばれる特定の amino 酸配列 GYG が K^+ に配位することを見出した[*Angew. Chem. Int. Ed.* **43**, 4265 (2004).]. この配位構造は K^+ の水和構造に近いので、 K^+ の脱水和によるエネルギー損失を、選択フィルターに結合して得られるエネルギー利得が相殺する。一方、 Na^+ の場合は、 Na^+ のイオン半径が選択フィルターにマッチしておらず、水和構造の方が安定であるため、選択フィルターに結合しにくいと考えられている。この業績により MacKinnon は 2003 年にノーベル化学賞を受賞した。

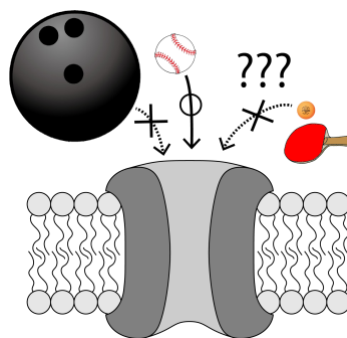


図1 イオンチャンネルの謎

野球ボールは通るのに、なぜピンポン玉は通らないのか？

選択フィルターに K^+ が結合している様子は原子分解能で明らかになった一方で、 Na^+ が水和と競合して選択されない様子は実験的に見えている訳ではなく、計算機シミュレーションによって見てきたかの議論がなされている。分子選択性のメカニズムを解明するためには、なぜ結合するのかと、(近い構造なのに)なぜ結合しないのかを両方明らかにする必要があるが、後者に関しては構造化学に基づく実験的なアプローチがこれまで困難であった。結晶構造解析や NMR は、結合するもの(認識されるもの)には決定的な情報を与えるが、それらと非常に近い化学構造にも関わらず結合しないもの(認識されないもの)がどのようにリジェクトされるのかについては直接的な情報を与えないためである。リジェクトの様子を「見る」ために計算機シミュレーションが専ら用いられているが、自由エネルギーの微妙なバランスを精度良く計算することは現状でもチャレンジングな問題であり、実験的なアプローチは不可欠である。

2. 研究の目的

種々のイオンチャンネルの選択フィルターに注目し、水和との競合によってどのようにイオンが選択されるかを実験的に分子レベルで明らかにすることを目的とする。これにより、イオン選択において水和が果たす役割を解明する。

3. 研究の方法

本研究では我々独自のボトムアップ・アプローチを用いる[*Angew. Chem. Int. Ed.* **57**, 5626 (2018).]. ボトムアップ・アプローチとは、小分子に関わる分子認識が生体分子の局所的な相互作用に起因していることに基づいて、その機能中心だけを取り出したペプチドと種々のリガンドとの相互作用を調べることで分子認識メカニズムを明らかにする、というものである。水溶液中では、ペプチド結合の水和により、 $\text{N-H}\cdots\text{O}=\text{C}$ の分子内水素結合が破壊されてしまうため、部分ペプチドの構造はタンパク質中のそれとは大きく異なる。一方、気相中では、溶媒分子が存在しない(あるいは、限定的な溶媒和)ため、分子内水素結合による2次構造が安定に形成される。そのため、ボトムアップ・アプローチは気相中に導入した分子を対象とした場合に有効である。特に、膜中はこの様な環境に近いので、イオンチャンネルの様な膜タンパク質への応用に適している。この方法の利点は、タンパク質中では結合しにくい様々なリガンド分子との錯合体も生成でき、過渡的な錯形成を捉えることができるという点である。例えば、KcsA の選択フィルターペプチドの Na^+ 錯体の観測に成功している。また、水分子を1個ずつ段階的に水和させることができ(水和クラスター)、水和による構造変化を分子論的に追跡することができる。

このような研究を実現するために、冷却イオン分光法を用いる(図2)[*J. Mol. Spectrosc.* **332**, 45 (2017).]. この方法は、エレクトロスプレー法により溶液中のイオンを取り出し、質量分析により特定のイオンを選択した後、冷却イオントラップで極低温に冷却する。これによって種々のコンフォメーションを瞬間的に凍結することができる。ここに波長可変レーザーを導入し、光吸収によって生成したフラグメントイオンを検出する。フラグメントイオンは光吸収が起きたときだけ生成するので、フラグメントイオン量をモニターしながらレーザーを波長掃引することで分光スペクトルを測定できる。この方法を、選択フィルターを切り出した部分ペプチドの種々の金属イオン錯体及びその水和クラスターに適用し、赤外分光法を用いて水和による錯構造の変化を追跡する。

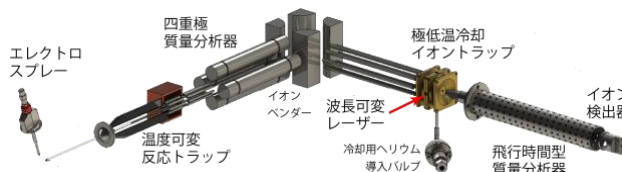


図2 冷却イオン分光装置

4. 研究成果

1) 各種金属イオンとカリウムイオンチャネル選択フィルター部分ペプチドの錯体の構造

本研究の準備段階では、 K^+ 、 Na^+ とカリウムイオンチャネル選択フィルター部分ペプチド (GYG: Ac-Y-NHMe) の構造が明らかになっており (図3), 選択されるイオン (K^+) と選択されないイオン (Na^+) で大きく構造が異なることが分かっていた。そこで、水和クラスターの研究を始める前に、他のアルカリ金属イオンおよびアルカリ土類金属イオンの錯体ではどうなるかを検討した。

詳細は紙面の都合上割愛するが、まずアルカリ金属イオン錯体では、 Li^+ 、 Na^+ 錯体で O/O/R 構造 (図3 参照) が主たる構造、 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+ 錯体で O/O (O/O') 構造が主たる構造となることが分かった。また、3つの異性体の偏り具合を見ると、 $K^+ < Rb^+ < Cs^+ < Na^+ < Li^+$ の順で偏りが大きくなることが分かった。 K^+ では3つの異性体がほぼ均等に分布していることが分かった。この序列はカリウムイオンチャネルのイオン透過性のしやすさ (透過速度) の順に一致しており、イオン選択性と錯体の構造分布に相関があることが明らかになった。アルカリ土類金属イオン錯体では全ての錯体で O/O/R 構造のみが観測された。アルカリ金属イオン錯体で得られた結果を演繹すれば、アルカリ土類金属イオンがカリウムイオンチャネルを透過しないことを意味しており、実際の挙動とも一致している。

以上の結果は、ChemPhysChem 誌に掲載され、表紙に採用されている (図4) [Chemphyschem 21, 712 (2020).]。

2) GYG- Na^+ および K^+ 錯体構造に対する水和構造

水和していない状態で、GYG- Na^+ および K^+ 錯体では異性体分布に差があることが明らかになっているが、さらに水和させたときにどのような構造変化が起こるのかを検討した。

実際には水分子を 10 個程度まで 1 個ずつ増やしながら構造変化を赤外分光で追跡したが、ここでは水分子 1 個だけ水和したときの結果について述べる。たった 1 個の水分子でも劇的な変化が起こる。

図5に GYG- Na^+ および K^+ 錯体の 1 水和クラスターの赤外スペクトルを示す。一見して分かることは、 K^+ 錯体では水がプロトン供与の形で水素結合を形成しているが、 Na^+ 錯体ではそのような構造が観測されないということである。両者とも、水分子は金属イオンに配位しているはずなので、 K^+ 錯体ではそれに加え、水素結合も形成しているということになる。

そこで、まず、 K^+ 錯体に対して、異性体分離した赤外分光法 (IR dip 分光法) を適用し、異性体分離と異性体ごとの赤外スペクトルを測定した。その結果、4つの異性体が共存していることが分かり、量子化学計算との比較により各異性体の構造が帰属された。

その結果、O/O, O/O', O/O/R (フェノール OH 基の向きの異なる2種) に水和している構造であり、それぞれで水は K^+ に配位し、かつ、C=OのO原子 (O/O, O/O') またはフェノール OH 基のO原子に水素結合していることが分かった。異性体分布は水和していないときとほぼ同じであった (O/O, O/O' が主たる構造)。

同様に Na^+ 錯体についても検討したところ、O/O, O/O', O/O/R 構造の Na^+ に水分子が配位した構造であり、水は水素結合を形成しないことが分かった。異性体分布は、水和していないときはO/O/R 構造が主たる構造であったのに対して、水和するとO/O 構造が主たる構造に変化することが分かった。

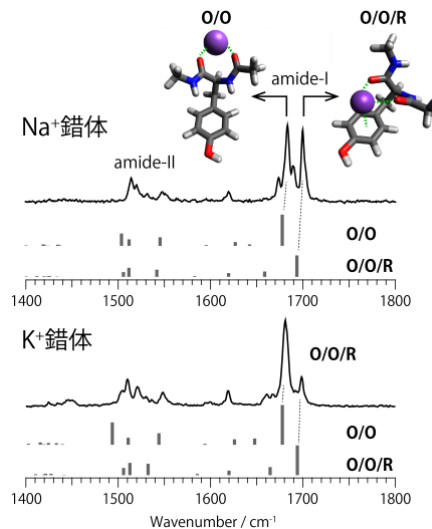


図3 GYGの Na^+ 及び K^+ 錯体の赤外スペクトルと構造帰属

amide-I バンド (C=O 伸縮) が Na^+ 錯体では1680と1700 cm^{-1} に2本観測されるが、 K^+ 錯体では後者が弱く観測される。量子化学計算の結果、前者は2つのC=Oが配位した構造 (O/O), 後者はベンゼン環も配位した構造 (O/O/R) のamide-I バンドと帰属された。

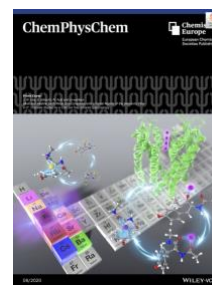


図4

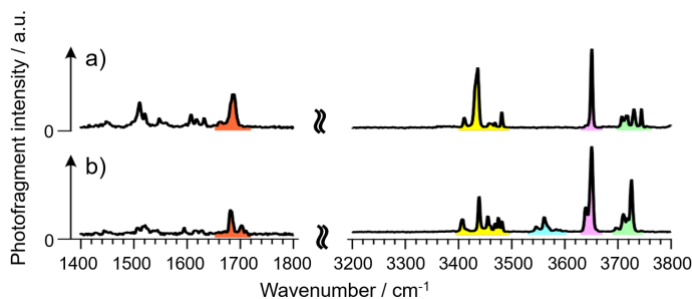


図5 a) GYG- Na^+ - H_2O 及び b) GYG- K^+ - H_2O の赤外スペクトルバンドの色分けは振動モードの帰属を示す (赤: C=O 伸縮, 黄: NH 伸縮, 青: 水の水素結合した OH 伸縮, 桃: フェノール (チロシン残基) OH 伸縮, 緑: 水のフリーな OH 伸縮)。

以上の結果より、水和するといずれの錯体でも 0/0 (0/0') が主たる構造となるが、水分子の配位構造が両者で異なることが明らかとなった (図 6)。Na⁺錯体では、水和により Na⁺の電荷が遮蔽され、その結果、ペプチドとの相互作用が弱まり、K⁺錯体と同様に 0/0/R 構造の寄与が小さくなったと考えられる。しかし、ペプチドと金属イオンの距離が水和によってどのくらい伸びるか (つまり、相互作用がいかにか弱まるか) を調べてみたところ、K⁺錯体では b (図 6 参照) が著しく伸び、全体的に KcsA の結晶構造にかなり近づくのに対して、Na⁺錯体ではいずれも僅かしか伸びないことが分かった。即ち、Na⁺錯体では、水和により異性体分布は K⁺錯体のそれに近づくものの、依然としてペプチドとの相互作用は強いことが分かった。最近の分子動力学シミュレーションによると、Na⁺がカリウムイオンチャネルに侵入する際には必ず水分子が一緒であり (つまり水和した状態)、さらに、イオンチャネルを通過するのに K⁺の場合の 10 倍ほどの時間がかかることが示唆されている [Nat. Chem. 10, 813 (2018).]. 従って、本研究で得られた結果は、このことを強く支持していると言える。

本研究の結果は、英国王立化学会 PCCP 誌に掲載され、裏表紙に採用されている [Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 12045 (2021).].

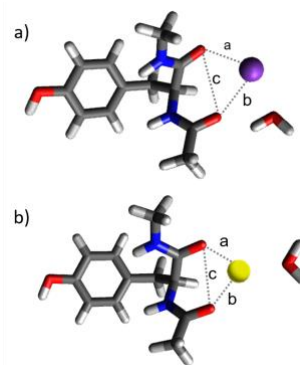


図 6 a) GYG-K⁺-H₂O 及び b) GYG-Na⁺-H₂O の 0/0 構造

3) Mg²⁺イオンチャネルに対する水和効果

カリウムイオンチャネルの場合、K⁺は完全に脱水和した状態で選択フィルターに取り込まれるが、K⁺より電荷密度の大きいイオンのチャネルでは、金属イオンの水和エネルギーが大きいため、完全な脱水和はエネルギー的に困難であり、水和した金属イオンが選択フィルターに捕捉・選択されると言われている。従って、その様なイオンチャネルでは水和が本質的に重要である。そこで、その様なイオンチャネルの例として最近結晶構造が明らかとなったマグネシウムイオンチャネル MgtE を取り上げることとした。結晶構造解析によれば、Mg²⁺選択フィルターに位置するアスパラギン酸残基のカルボキシレート基 (-COO⁻) が、水和した Mg²⁺の第一水和殻の水分子に結合していることが分かっている。これは、-COO⁻と Mg²⁺が直接コンタクトしたイオン対状態と比較すると、電離状態にあると言える。バルク水溶液中では、Mg²⁺の水和エネルギー (約 1800 kJ mol⁻¹ [Phys. Chem. 81, 81 (1984), J. Chem. Educ. 54, 540 (1977).]) が -COO⁻と Mg²⁺のイオン結合エネルギー (約 1500 kJ mol⁻¹ [Chem. Phys. 295, 175 (2003).]) より高いため、電離状態の方が安定である。一方で、水が少ない環境下、例えば水分子が 6 個程度では、水和エネルギー (約 1000 kJ mol⁻¹ [Chem. Phys. 295, 175 (2003).]) の方が小さいため、イオン対状態の方が安定である。従って、第一水和殻の 6 個の水分子の水和だけでは選択フィルター内の電離構造を保つことは困難である。実際にその様な視点で結晶構造を見ると、さらに +7 個程度の水分子が存在し、それらの水分子が電離構造の安定化には不可欠であると考えられる。しかし、これまで、-COO⁻・Mg²⁺に何個の水分子が水和すると電離状態に転移するかは実験的には明らかになっていない。そこで、酢酸イオン (CH₃COO⁻) と Mg²⁺のイオン対に水分子を 1 個ずつ段階的に付加して水和クラスター ([CH₃COOMg]⁺·(H₂O)_n) を生成し、何個の水分子が水素結合すると電離するかを赤外分光で明らかにすることを目指した。

図 7 にイオン対状態と電離状態で赤外スペクトルがどの様に変化するかを計算した結果を示す。この計算では [CH₃COOMg]⁺·(H₂O)₆ をモデルとしたが、このサイズのクラスターでは当然イオン対状態の方が安定である。図中にバンドの帰属を示す。イオン対状態における各バンドは、低波数側から CH の変角振動 $\nu_{\text{bend}}^{\text{CH}}$ 、COO⁻の対称伸縮振動 $\nu_{\text{s}}^{\text{COO}^-}$ および逆対称伸縮振動 $\nu_{\text{as}}^{\text{COO}^-}$ 、水の変角振動 $\nu_{\text{bend}}^{\text{HOH}}$ である。一方の電離状態では、COO⁻の伸縮振動のカップリングが切れて $\nu_{\text{s}}^{\text{COO}^-}$ と $\nu_{\text{as}}^{\text{COO}^-}$ が消滅し、代わりに C-O の伸縮振動 $\nu_{\text{str.}}^{\text{CO}^-}$ と C=O の伸縮振動 $\nu_{\text{str.}}^{\text{CO}}$ が出現する。従って、イオン対状態から電離状態に遷移すると、 $\nu_{\text{s}}^{\text{COO}^-}$ が消え、代わりにそばに低エネルギー側に $\nu_{\text{str.}}^{\text{CO}^-}$ が出現するという変化が実測スペクトルで観測されると予測される。論文投稿準備中のため、実験結果をここに示すことは差し控えるが、水分子が 13 個までは $\nu_{\text{s}}^{\text{COO}^-}$ が観測されるが、14 個になると突然 $\nu_{\text{s}}^{\text{COO}^-}$ が消滅し、 $\nu_{\text{str.}}^{\text{CO}^-}$ と予測される位置にバンドが出現した。従って、水和水が 13 個から 14 個のと

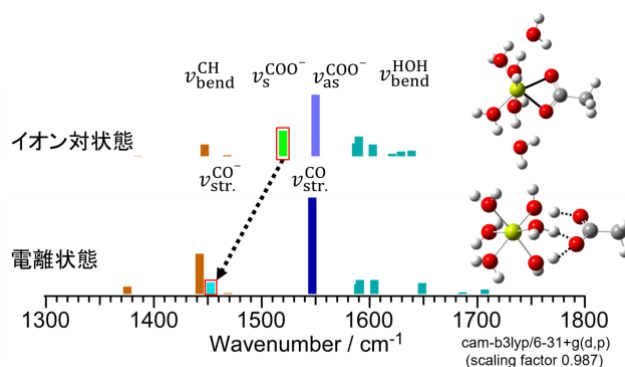


図 7 [CH₃COOMg]⁺·(H₂O)₆ の計算赤外スペクトル

ここで、イオン対状態から電離状態に転移したと示唆される。また、電離状態の安定化には最低14個の水分子の水和が必要であることが明らかになった。これまで、イオンチャンネル内のイオンの水和は第一水和殻のみ重視されてきたが、本研究の結果は、それでは不十分であり、より多くの水分子がイオン選択に関わっていることを示唆している。

4) バリノマイシン-Na⁺およびK⁺錯体構造に対する水和効果

これまでイオンチャンネルのイオン選択性に着目して研究してきたが、さらにそれを発展させ、イオン選択性分子であるイオノフォアの研究にも着手した。バリノマイシンはK⁺に対して高い選択性を示すイオノフォアであり(Na⁺より3~4桁高い選択性)、そのイオン選択性やイオン取り込み機構に関しては古くから多くの研究がなされてきた。最近、清浄表面に吸着したバリノマイシンと水の相互作用をSTMで観察するという研究が報告され[*Sci. Rep.* **3**, 2461 (2013).], 水が付着するとバリノマイシンの構造が変化する様子が明らかになった。しかし、我々が見たいのは、さらに金属イオンが共存したときにどうなるかである。

そこで、冷却イオン分光法を用いて、真空中に取り出したバリノマイシン・アルカリ金属イオン錯体に水分子を1個ずつ付加して、段階的な水和によってバリノマイシン・アルカリ金属イオン錯体の構造がどのように変化するかを、赤外分光により研究した(図8)。その結果、Na⁺, K⁺はいずれもバリノマイシンに包接されるが、水分子が1個水素結合すると、K⁺錯体では水がバリノマイシンに水素結合して、水なしの場合とほとんど同じ構造であるのに対して、Na⁺錯体では水分子がNa⁺に配位し、開いた構造(Na⁺が外に引き出されようとしている構造)を取ることが分かった。つまり、水分子1個でもイオン選択性が発現している。さらに興味深いことに、水和K⁺錯体では、水なしのときに比べてバリノマイシンの大きさが収縮するということが分かった。Na⁺錯体では内部に水分子が侵入するために包接錯体は大きくなる。K⁺を包接したバリノマイシンは細胞膜中を拡散しイオンを輸送するので、水和による包接錯体収縮はその拡散過程を促進することにつながる。つまり、水分子がイオン選択だけでなく、イオン輸送機構にも寄与していることが示唆された。

以上の結果は、米国化学会 *J. Phys. Chem. Lett.* 誌に掲載され、表紙に採用された(図9) [*J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 1754 (2021).].

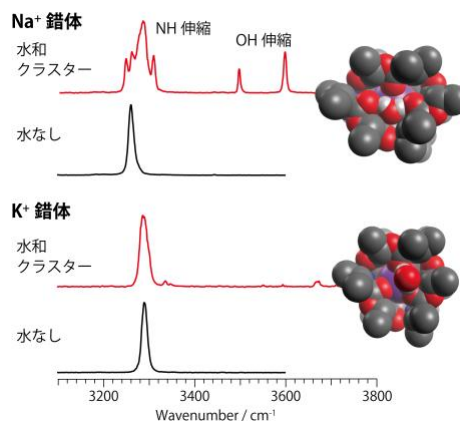


図8 バリノマイシン-Na⁺及びK⁺錯体と水1クラスターの赤外スペクトル



図9

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 0件）

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 Mitsuhiro, Dedonder Claude, Jouvet 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
1. 著者名 Ishiuchi Shun-ichi, Sasaki Yuta, Lisy James M., Fujii Masaaki	4. 巻 21
2. 論文標題 Ion-peptide interactions between alkali metal ions and a termini-protected dipeptide: modeling a portion of the selectivity filter in K ⁺ channels	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 561~571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp05839c	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 Tamura Masato, Sekiguchi Tsubasa, Ishiuchi Shun-ichi, Zehnacker-Rentien Anne, Fujii Masaaki	4. 巻 10
2. 論文標題 Can the Partial Peptide SIVSF of the α -2-Adrenergic Receptor Recognize Chirality of the Epinephrine Neurotransmitter?	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2470 ~ 2474
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.9b00184	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 Sohn Woon Yong, Kim Jeong Jin, Jeon Myeongwon, Aoki Takuma, Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki, Kang Hyuk	4. 巻 20
2. 論文標題 Entropic effects make a more tightly folded conformer of a β -amino acid less stable: UV-UV hole burning and IR dip spectroscopy of L-tryptophan using a laser desorption supersonic jet technique	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 19979 ~ 19986
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp02106f	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 Negoro Takumi, Hirata Keisuke, Lisy James M., Ishiuchi Shun-ichi, Fujii Masaaki	4. 巻 23
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 12045 ~ 12050
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

〔学会発表〕 計14件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件）

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バリノマイシン-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

1. 発表者名 石内俊一
2. 発表標題 計測系から見た分子集合体の機能計測 イオントラップ分光
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石内俊一
2. 発表標題 エレクトロスプレー・冷却イオントラップ法によるK ⁺ イオンチャンネル部分ペプチド・アルカリ金属イオン錯体の赤外分光 イオン選択性へのボトムアップ・アプローチ
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 笠井賢一
2. 発表標題 冷却イオントラップに捕捉した極低温イオンのためのIR-IRイオンディップ分光法の開発
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 根来拓己
2. 発表標題 エレクトロスプレー・冷却イオントラップ法によるカリウムイオンチャネルのイオン選択性に対する水和効果
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shun-ichi Ishiuchi
2. 発表標題 Complexes of alkali metal ions and partial peptide of K ⁺ channel studied by ESI / cryogenic ion trap laser spectroscopy
3. 学会等名 The 10th conference on Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI2018) (国際学会)
4. 発表年 2018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