

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Gas phase spectroscopic study of bio and bio-relevant molecules: Role of inter- and intramolecular interactions on conformations
著者(和文)	SohnWoonyong
Author(English)	Woonyong Sohn
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9736号, 授与年月日:2015年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:藤井 正明,原 正彦,山元 公寿,野村 淳子,酒井 誠
Citation(English)	Degree:., Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9736号, Conferred date:2015/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第	号	学位申請者氏名	Woonyong Sohn	
論文審査 審査員		氏名	職名		
	主査	藤井 正明	教授	酒井 誠	准教授
	審査員	山元 公寿	教授		
		原 正彦	教授		
		野村 淳子	准教授		

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Gas phase spectroscopic study of bio and bio-relevant molecules: Role of inter- and intramolecular interactions on conformations」と題し、生体およびその関連分子に対してレーザー脱離超音速ジェット法を利用した気相分光を適用し、その構造について精査した成果をまとめたものである。本論文は英語で記述され全6章で構成されている。

第1章「General introduction」では、生体およびその関連分子の分光学的研究の現状と課題を述べるとともに、生体関連分子にレーザー脱離超音速ジェット法を利用した気相分光を適用し、その構造（コンフォメーション）を明らかにすることで神経伝達物質の分子認識機構へアプローチすることを提案するとともに、本研究の意義、目的について記述している。

第2章「Experimental methods」では、本論文で用いた生体およびその関連分子の気相分光法、即ち、共鳴多光子イオン化法、UV-UV ホールバーニング分光法、IR dip 分光法の原理および実験手法について記述している。また、構造解析に用いた量子化学計算法についても記述している。

第3章「UV and IR spectroscopy of an artificial amino acid, homophenylalanine, and a peptide possessing it by laser desorption supersonic jet technique」では、UV-UV ホールバーニング分光および IR dip 分光により、ホモフェニルアラニン (HPhe) およびフェニルアラニン (Phe) 類似体におけるコンフォマー数を精査するとともに、それらのコンフォマー毎の分子内水素結合構造を量子化学計算との比較により明らかにした。特に HPhe では 10 個ものコンフォマーを観測し、すべてのコンフォマーの構造を決定した。また、HPhe に 2 つの Gly 塩基を付加した Ac-HPhe-Gly-Gly-NH₂ に対しても本研究手法を適用し、コンフォマー数およびそれらの構造決定を行った。これらの結果は、本研究手法が多くコンフォメーションを有するフレキシブルな分子の構造解析に極めて有効である事を同時に示している。

第4章「UV and IR spectroscopy of adrenaline, adrenaline-water and complex of catechol and a partial peptide of adrenaline receptor by laser desorption supersonic jet technique」では、カテコールアミン系神経伝達物質である分子認識機構へアプローチとして、神経伝達物質であるアドレナリンおよびアドレナリン・水クラスターの構造解析、並びに、受容体タンパク質の分子認識部位である部分ペプチド (Ser-Ile-Val-Ser-Phe-NH₂) の構造について議論した。最も重要な結果は、アドレナリンの分子内の側鎖とカテコール環の間に生じる π -H 結合が、水分子が付加したアドレナリン・水クラスターでは増強される事である。これは、分子認識機構において、水分子がアドレナリンを始めとする神経伝達物質のコンフォメーションに極めて重要な影響を与える事を示唆している。

第5章「UV and IR spectroscopy of acetaminophene by laser desorption supersonic jet technique」では、本論文で用いた研究手法を酵素阻害剤であるアセトアミノフェンに対して適用した結果について記述している。解析の結果から、アセトアミノフェンは側鎖部に 2 種のコンフォマーが共存し、それぞれがフェノール基の cis-, trans-の異性体を有する事を明らかにした。

第6章「General conclusion」では、本論文を総括している。

これを要するに、本論文は生体およびその関連分子に対するレーザー脱離超音速ジェット法を利用した気相分光がそれらのコンフォメーションおよび水素結合構造の解析に極めて有効であり、かつ、ボトムアップ的にそれらの構造から例えば分子認識機構といった様々な反応を解明できる可能性を示しており、理学上貢献するところが大きい。よって本論文は博士 (理学) の学位論文として十分な価値があると認められる。