

## 円二色性スペクトル解析ソフトウェアの開発

○松川 有香 崎山 博史

山形大学理学部(〒990-8560 山形市小白川町 1-4-12)

## 【緒言】

タンパク質の詳細な立体構造はX線結晶構造解析によって求められるが、結晶化が困難なタンパク質も数多くあり、このようなタンパク質の構造を知る事は難しい。そこで、結晶化が不可能な常磁性色素タンパク質を対象として、円二色性スペクトルのデータだけから常磁性中心周りの構造を解析することを旨として、円二色性スペクトル解析ソフトウェアを開発した。

## 【方法】

ソフトウェアの開発およびデータ解析は iMac (MacOS 9.2) で行った。プログラミングには RealBASIC を用いた。密度汎関数法の計算には Gaussian 03 を用いた。

## 【結果】

今回開発したソフトウェアは、円二色性スペクトルの数値データを読み込み、ガウス関数の和で表した理論曲線との自動フィッティングを行う。自動フィッティングプログラムは円二色性スペクトルのピークの位置を判定し、含まれるスペクトル成分を求める。

一例として、光学活性な銅(II)錯体  $[\text{Cu}(\text{mben})_2]$  (mben: *N*-{1-methylbenzyl}ethylenediamine) [文献1] の円二色性スペクトル(図1)の解析例を示す。得られたスペクトル成分を元に銅周りの配位数を決定し、密度汎関数法によって分子構造を予測した(図2)。発表では、ソフトウェアのその他の機能やその他の解析例についても報告する。

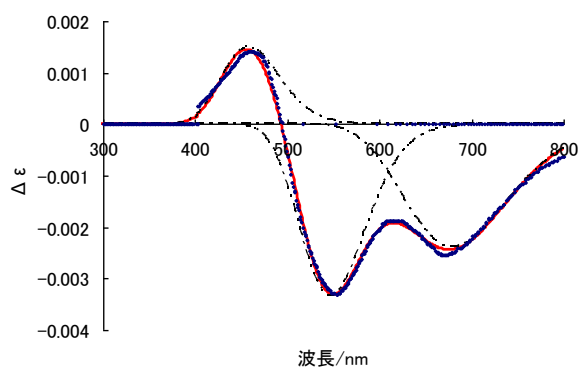


図1 円二色性スペクトル

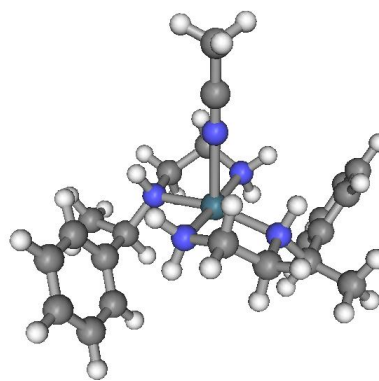


図2 アセトニトリル中の銅(II)錯体の予想構造

## 参考文献

- 1 H. Sakiyama, H. Okawa, N. Matsumoto, S. Kida, and I. Murase, *Inorg. Chim. Acta*, 1989, **162**, 65-70.