

様式2

平成29年度 生体医歯工学共同研究実施報告書

受理年月日	
受理番号	2056

平成30年 3月20日

生体医歯工学共同研究拠点 研究所長会議 議長 殿

共同研究代表者

所属機関 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター

職 名 教授

氏 名 富永圭介 印

勤務先所在地 〒657-8501

神戸市灘区六甲台町1-1

電話番号 078-803-5684

FAX番号 078-803-5684

E-mailアドレス tominaga@kobe-u.ac.jp

下記により、共同研究の実施報告を致します。

記

研究題目	(和) 生体関連分子と薬剤のテラヘルツスペクトルの測定と計算 (英) Terahertz spectroscopy and theoretical calculation on biologically important molecules and drug molecules		
研究領域	1. 生体材料に関する基礎・応用研究 2. 生体工学に関する基礎・応用研究 3. 生体機能分子に関する基礎・応用研究 ④. 化学・電気・機械・材料工学の生体応用研究		
研究期間	平成 29 年 6 月 1 日 ~ 平成 30 年 3 月 31 日		
研究組織			
氏名	所属機関・部局等	職名	役割分担
富永圭介	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	教授	研究全般
張峰	神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	講師(研究機関研究員)	測定実験と理論計算
佐々木哲朗	静岡大学電子工学研究所	特任教授	測定実験
生体医歯工学共同研究拠点内対応教員	(共同研究をした教員名を記載) 佐々木哲朗特任教授(静岡大学電子工学研究所)		

研究成果		
<p>抗炎症薬 非ステロイド系抗炎症薬ジフルニサル[®]の測定を引き続きおこなった。ジフルニサルには結晶多形が存在し、結晶系III型はテラヘルツ帯のバンドが低温でシャープな形状を示すが、結晶系I型はブロードな形状を示すことを我々は今まで示してきた。そこで、I型の温度変化を詳細に検討した。10 cm⁻¹から200 cm⁻¹のテラヘルツ帯の吸収スペクトルの温度変化を10 Kから常温まで測定した。その結果、10 cm⁻¹から40 cm⁻¹、および150 cm⁻¹から200 cm⁻¹の領域では、吸収スペクトルのバンドは低温でシャープであるが、40 cm⁻¹から150 cm⁻¹の中間領域では、極低温でもバンドはシャープにならずブロードなスペクトル形状を示した。ジフルニサルには分子内のある単結合の回転により構造異性体が存在するが、単位格子に分子が複数存在するため、I型ではその混合物として存在する。DFT計算の結果、10 cm⁻¹から40 cm⁻¹、および150 cm⁻¹から200 cm⁻¹の波数帯では、それぞれ、純粋な分子間振動、および純粋な分子内振動であることがわかり、構造異性体の組み合わせにより振動モードの振動数には変化がないが、40 cm⁻¹から150 cm⁻¹の中間領域では、分子内および分子間振動が混合したモードであり、構造異性体の組み合わせにより振動数が変化することがわかった。このことがスペクトルの線形に影響を与えており、40 cm⁻¹から150 cm⁻¹の中間領域が構造異性体の存在に敏感であることがわかった。この他、フッ化フェノールや(グリシン)₅、また安息香酸二量体の測定を行った。</p>		
使用した設備・資料・試料等	連続波 GaP テラヘルツ分光スペクトル測定装置 液体ヘリウム	
本研究成果に関連する論文発表状況		
なし		
次年度の共同研究継続の有無	<input checked="" type="radio"/> ・ 無	拠点内対応教員とご相談の上ご記入ください。 継続の場合には次年度の研究計画をご記入願います。
次年度の研究計画(継続の場合)		
<p>引き続き、水素結合を有する生体関連分子や薬剤と関連する分子のテラヘルツ帯(10 cm⁻¹ から 200 cm⁻¹)の吸収スペクトルの温度変化の測定を行う。分子としては、アミノ酸とタンパク質を橋渡しするために、長鎖ペプチドとして、(グリシン)₅ を選ぶ。既に低温測定は行っているが、10 K からの温度変化を詳細に検討する。本年度、安息香酸二量体のテラヘルツスペクトルの温度変化を調べたところ、極低温で観測されていたいくつかのバンドが 80 K 付近で”消失” “することを見出した。この原因はまだわからないが、安息香酸二量体は水素結合に関与しているプロトンのトンネル移動等、興味深い現象を示すため、それらと関連している可能性がある。そこで、来年度は重水素化した安息香酸二量体を合成し、同様の温度変化測定を行う。また、神戸大学において固体 DFT 計算を行う。ソフトとしては、CRYSTAL14 を用いる。得られたスペクトルと実験との比較を行い、振動バンドの同定を行い、最適な基底関数、汎関数を決定する。分子科学研究所の計算機センターに CRYSTAL14 が導入されているため、積極的に分子科学研究所のスーパーコンピュータを用いる。以前、我々が開発した、低振動モードを並進の分子間振動、ライブレーション(回転の分子間振動)、および分子内振動の3つの成分に分解する手法を本系にも適用し、低振動の基準振動についての性質を調べる。</p>		

