

様 式 F - 7 - 1

## 科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実施状況報告書（研究実施状況報告書）（平成 27 年度）

1. 機関番号 

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

 2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学

3. 研究種目名 基盤研究(C)（一般） 4. 補助事業期間 平成 25 年度～平成 29 年度

5. 課題番号 

2	5	4	0	0	3	3	5
---	---	---	---	---	---	---	---

6. 研究課題名 ヘム蛋白質における多体効果の理論研究-放射光分光の視点から-

## 7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
1 0 4 1 5 2 1 8	タグチ ムネタカ 田口 宗孝	物質創成科学研究科	助教

## 8. 研究分担者

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名

## 9. 研究実績の概要

本研究は、鉄の多体効果に注目し、物性物理の土俵でたんぱく質を電子論的に議論することを目的としている。具体的には、放射光の物性研究で成功を収めた数値シミュレーション法をヘムタンパク質に適用し実験スペクトルと比較することで、そのさまざまな機能に関するヘム鉄の電子状態を理論的に解明することである。

本研究であげた具体的な計画項目は、鉄の多体効果とポルフィリン環の強い混成効果を同等に取り扱うことのできるクラスター模型の構築、基質分子の可逆的な吸脱着による鉄の電子状態変化の機構解明、ヘム鉄の局所的な構造変化が鉄の 3 d 電子状態に与える影響、の三つであった。

昨年度までに、のクラスター模型の解析的模型の構築、の基質分子の変化による鉄原子の電子状態の変化についてはポルフィリン環や基質分子の分子軌道を正確に計算しそれを強い電子相関をもつ 3 d 軌道とうまく融合することによって完成しており、ほぼ正確なエネルギー準位を再現できるようになった。また、のヘム鉄の局所的な構造変化に伴う電子状態の変化についても進展があり、ヘム鉄がポルフィリン環面からずれることによる効果なども正確に取り入れられるようになった。

しかしながら昨年度の研究の重要課題でもあったスピン状態の変化については、未だに正確に記述することができていない。ヘム鉄のスピン状態はヘムタンパク質の機能性と密接に関連していることが広く知られているがその電子論的な説明ができないのが現状である。

## 10. キーワード

(1) 金属タンパク質	(2) クラスタ計算	(3) 共鳴 X 線発光分光	(4)
(5)	(6)	(7)	(8)

## 11. 現在までの進捗状況

(区分) (3) やや遅れている。

(理由)

昨年度からの重要課題である、ヘム鉄のスピン状態を記述するモデルの構築に遅れが生じている。基質分子の違いによりヘム鉄の電子状態(エネルギー準位)が微妙に変化することは昨年度までの研究から明らかとなってきたがスピン状態を変化させる要因が説明できていない。

## 12. 今後の研究の推進方策 等

(今後の推進方策)

スピン状態を正確に記述できないと上述したが、正確には、半経験的な結晶場パラメーターを入れることでスピン状態自体は実は記述することはできている。しかしながらこの結晶場パラメーターがどうして基質分子の違いで大きく変化するのかが不明である。対策としては、様々な基質分子でどのように結晶場パラメーターが変化していくかを系統的に調べその傾向を探り出すことで、その糸口を見出したい。

(次年度使用額が生じた理由と使用計画)

(理由)

国内出張を二回ほどキャンセルをしたため。

(使用計画)

次年度の国内出張にあてるつもりである。

(課題番号: 25400335)

(注)・印刷に当たっては、A4判(縦長)・両面印刷すること。

## 13. 研究発表(平成27年度の研究成果)

(雑誌論文) 計(2)件/うち査読付論文 計(2)件/うち国際共著 計(0)件/うちオープンアクセス 計(0)件

著者名		論文標題				
M. Taguchi, A. Chainani, S. Ueda, M. Matsunami, Y. Ishida, R. Eguchi, S. Tsuda, Y. Takata, M. Yabashi, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Ishikawa, H. Daimon, S. Todo, H. Tanaka, M. Oura, Y. Senba, H. Ohashi, and S. Shin		Temperature Dependence of Magnetically Active Charge Excitations in Magnetite across the Verwey Transition				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Physical Review Letters	有	115	2015	256405-1~5	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1103/PhysRevLett.115.256405						
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						

著者名		論文標題				
P. A. Bhoje, A. Kumar, M. Taguchi, R. Eguchi, M. Matsunami, Y. Takatay, A. K. Nandy, P. Mahadevan, D. D. Sarma, A. Neroni, E. Saioglu, M. Lezaic, M. Oura, Y. Senba, H. Ohashi, K. Ishizaka, M. Okawa, S. Shin, K. Tamasaku, Y. Kohmura, M. Yabashi, T. Ishikawa, K. Hasegawa, M. Isobe, Y. Ueda, and A. Chainani		Electronic structure evolution across the Peierls metal-insulator transition in a correlated ferromagnet				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Physical Review X	有	5	2015	041004-1~9	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1103/PhysRevX.5.041004						
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						

(学会発表) 計(2)件/うち招待講演 計(0)件/うち国際学会 計(2)件

発表者名		発表標題	
M. Taguchi, A. Chainani, S. Ueda, M. Matsunami, Y. Ishida, R. Eguchi, S. Tsuda, Y. Takata, M. Yabashi, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Ishikawa, H. Daimon, S. Todo, H. Tanaka, M. Oura, Y. Senba, H. Ohashi, and S. Shin		Revising the Electronic Structure of Magnetite Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> by Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy	
学会等名	発表年月日	発表場所	
International Conference on Electron Spectroscopy and Structure: ICES-15 (国際学会)	2015年09月28日 ~ 2015年10月02日	Stony Brook University (Stony Brook, USA)	

発表者名	発表標題	
M. Taguchi, A. Chainani, S. Ueda, M. Matsunami, Y. Ishida, R. Eguchi, S. Tsuda, Y. Takata, M. Yabashi, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Ishikawa, H. Daimon, S. Todo, H. Tanaka, M. Oura, Y. Senba, H. Ohashi, and S. Shin	Revisiting the electronic structure of magnetite by hard X-ray photoelectron spectroscopy	
学会等名	発表年月日	発表場所
10th International Symposium on Atomic Level Characterizations (国際学会)	2015年10月25日 ~ 2015年10月30日	Kunibiki Messe (Matsue, Shimane)

(図書) 計(0)件

著者名	出版社		
書名	発行年	総ページ数	

## 14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

(出願) 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

(取得) 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

## 15. 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

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

(課題番号: 25400335)

(注)・印刷に当たっては、A4判(縦長)・両面印刷すること。

16.本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

(1)国際共同研究: -

17.備考

--