

(様式 1-1)

提出日：2026 年 4 月 10 日

2025 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

研究成果報告書

(1) 事業名（下記より該当事業名を選択し、ほかは削除してください。）

MicroED

(2) 研究代表者

氏名：秋津貴城

所属機関名・部局名・職名：東京理科大学・理学部第二部化学科・教授

(3) 研究課題名（申請時に記載したものと同一課題名を記入してください。）

アミノ酸シッフ塩基金属錯体やリゾチーム複合体の微小結晶構造解析

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名：栗栖源嗣 教授（研究室名：蛋白質結晶学研究室）

(5) 研究成果の概要

*背景および目的、方法と結果について、公開して差し支えない範囲で記載。

(アゾ) アミノ酸シッフ塩基銅 (II) 錯体は、SOD 活性、抗菌活性、六価クロム還元などの機能を有する。本研究では、Trp、Cys、Ser、Val などのアミノ酸部分を用いて、単座イミダゾール配位を有する新規錯体を合成した。X 線回折に適した単結晶が得られなかったため、粉末 X 線構造回折測定を行ったが、リートベルト解析は困難であった。そこで、MicroED を用いて微結晶（粉末）試料の構造解析を行ったところ、目的錯体の（多形）結晶構造だけでなく、これまで同定されていなかった副生成物や解離生成物の結晶構造も明らかになった。

一例として、Typ を使用したシッフ塩基銅(II)錯体と副生成物の系を取り上げる。

Typ 錯体の結晶学的データ：79 K、斜方晶系、 $P2_12_12_1$ 、 $Z=4$ 、 $a=5.23$ 、 $b=9.20$ 、 $c=49.80$ Å、 $V=2397$ Å³、 $R=0.1766$ (6570)、 $wR_2=0.4326$ (7324)、 $S=1.776$ 。

Typ 複合体（イミダゾール架橋 MOF）の副生成物の結晶学的データ：79 K、斜方晶系、 $P_{mn}2_1$ 、 $Z=2$ 、 $a=13.78$ 、 $b=6.10$ 、 $c=7.17$ Å、 $V=603$ Å³、 $R=0.1315$ (1711)、 $wR_2=0.3082$ (1923)、 $S=1.067$

本研究の結果、いくつかの (アゾ) アミノ酸シッフ塩基銅 (II) 錯体の新規結晶構造が解析された。さらに副生成物が得られたことから、金属イオンから容易に解離するシッフ塩基配位子を生成するアミノ酸と、容易には解離しない配位子を生成するアミノ酸とが存在することが明らかになった。