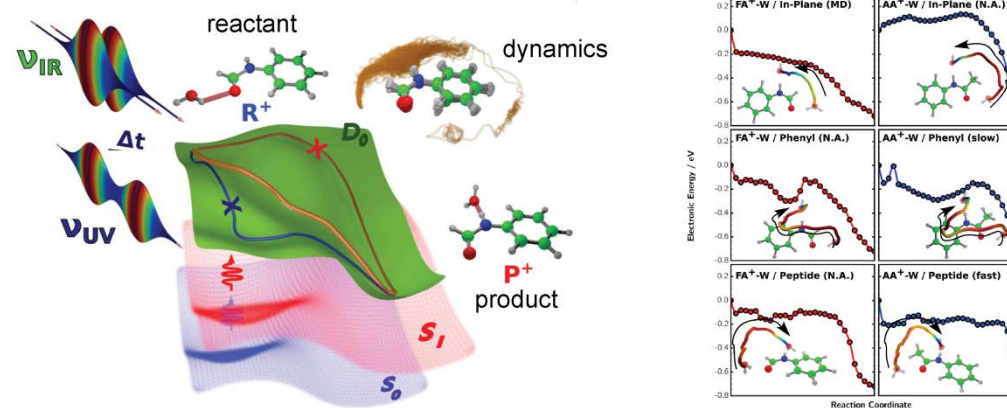


理論および実験によるペプチド結合水和ダイナミクス環境効果

(東工大化生研) 宮崎充彦・塚田耕平・ワイラーマーティン・藤井正明、(ベルリン工科大)ドプファーオットー、(ウルツブルグ大)ウォルグムスマティアス・メトリッヒローランド

Deciphering environment effects in peptide bond solvation dynamics by experiment and theory

Matthias Wohlgemuth, Mitsuhiro Miyazaki, Kohei Tsukada, Martin Weiler, Otto Dopfer, Masaaki Fujii, and Roland Mitrić



生体機能を考える上で、タンパク質周辺の水分子のダイナミクスは重要な役割を果たす。この研究では、これら水分子の運動がその水和ポテンシャルエネルギーだけではなく、エネルギー再分配過程の速度により支配されていることを時間分解分光と非経験的分子動力学シミュレーションによる実験・理論の協同により初めて明らかにした。

Most proteins work in aqueous solution and the interaction with water strongly affects their structure and function. In this work we provide a detailed atomistic picture of the water rearrangement dynamics around the peptide linkage in the two model systems formamide and acetamide, which simply differ by the presence of a methyl group at the peptide linkage. The combination of picosecond pump-probe time-resolved infrared spectroscopy and molecular dynamics simulations demonstrates that the solvation dynamics is strongly influenced by this small structural difference due to the efficiency of the kinetic energy redistribution rather than the shape of the potential energy surface.