冷却イオントラップ赤外分光法による天然イオノフォアにおけるイオン認識機構の解明

（東工大理 [1]）○平田　圭祐 [1]

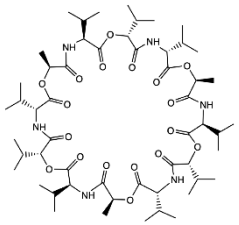
Revealing ion recognition mechanisms of naturally occurring ionophores by cryogenic ion trap infrared spectroscopy

([1]*Graduate School of Science, Tokyo Institute of Technology*)
○Keisuke Hirata[1]

Molecular/ion recognition plays a fundamental role in life. Ionophores are molecules that selectively bind to certain ions and are potential antibacterial drugs due to their high biological activity resulting from ion selectivity. On the contrary, the principle of why ion selectivity emerges remains unclear. In this study, we aimed to elucidate the principle of ion selectivity of ionophores at the molecular level using an original methodology combining mass spectrometry and cutting-edge gas-phase laser spectroscopy. The results showed that valinomycin, a K^+ ionophore, can encapsulate ions of different sizes by changing the cavity size. For Na^+ with a low complexation constant with VM, however, water molecules interact directly with Na^+ by entering the cavity, which induces structural distortion of VM.[1,2] A new ion recognition mechanism has been revealed that is driven by structural changes caused by water molecules.

Keywords : Infrared spectroscopy, Ion recognition, gas-phase spectroscopy

生体における分子/イオン認識は生命現象の根幹をなす。イオノフォアはある特定のイオンと選択的に結合する分子であり、イオン選択性に起因した高い生理活性から抗菌薬への応用が期待されている。しかし、なぜイオン選択性が発現するのか、その原理は不明瞭であった。本研究では、質量分析法とレーザー分光法を組み合わせた冷却イオントラップ赤外分光法と呼ばれる独自の方法論を用いて、イオノフォアのイオン選択性の原理を分子論的に解明することを目指した。その結果、K^+イオノフォアであるバリノマイシン(VM)では異なる大きさのイオンであってもキャビティの大きさを変えることでイオンを包接できることが明らかになった。しかし、VM との錯結合定数が低い Na^+では水分子がキャビティ内へ入り込み直接 Na^+と相互作用することで VM の構造歪みが誘起されることが明らかになった。[1,2] 従来、イオノフォアはイオンの大きさを識別すると考えられてきたが、水分子による構造変化を駆動力とする全く新たなイオン認識機構が明らかになった。



バリノマイシン

1) K. Hirata *et al*., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2023**, *25*, 1075. 2) K. Hirata *et al*., *J. Phys. Chem. Lett.* **2023**, *14*, 5567.

© The Chemical Society of Japan