目　　次

まえがき……井上　祥平… i

1　構造と相互作用……池上　明… 1

1　序論 …… 1
2　タンパク質の高次構造と分子内相互作用 …… 2
2.1　タンパク質の高次構造 …… 4
2.2　分子内相互作用の特徴 …… 5
2.2.1　選択的相互作用 …… 5
2.2.2　非選択的相互作用 …… 6
2.3　立体構造を決めている因子 …… 6
2.4　戻性と可逆変性 …… 7
3　高次構造の安定性と変化 …… 8
3.1　自由エネルギー最小とゆらぎ …… 8
3.2　構造変化とその速度論 ……10
4　低分子との相互作用と構造変化……11
4.1　非特異的相互作用 ……11
4.2　特異的相互作用 ……12
5　タンパク質間相互作用と機能……14
5.1　タンパク質間の相互作用と重合 ……14
5.2　ヘモグロビンの構造と機能 ……15
5.3　アロステリック効果とアロステリックタンパク質 ……18
6　相互作用と構造変化に関する一般論 …21
6.1　統計力学的モデル ……21
6.2　タンパク質と低分子との相互作用 ……24
6.2.1　非特異的相互作用 ……24
6.2.2　特異的相互作用 ……26
6.2.3　アロステリック効果 ……27
文献 ……27

<相互作用の観測>……29

2　合成高分子における相互作用の観測……引地　邦男…31

1　はじめに ……31
2　X線回折による方法 ……31
2.1　構造と conformational analysis（配座解析） ……31
2.2　熱膨張 ……32
2.3　X線回折強度の温度変化 ……34
2.3.1　温度因子 ……34
2.3.2　相転移による強度変化 ……36
2.3.3　熱膨張と強度の温度変化 ……37
3　磁気共鳴による方法 ……38
3.1　広幅核磁気共鳴 ……38
3.2　吸着水および吸着した溶媒の挙動 ……40
3.3　NMRスペクトルに対する常磁性イオンの効果 ……41
4　その他の方法……43
文献 ……44

3　生体高分子における相互作用の観測……坪井　正道…47

1　はじめに ……47
2　ウイルスの構成とその中での相互作用の推定 ……58
3　細胞の構成とその中での相互作用の推定 ……50
4　タンパク分子と他分子との相互作用の観測 ……50
5　タンパク分子の重水素交換反応速度

に現われる分子間相互作用の観測 ……54
6　核酸と他分子との相互作用の観測 ……68
7　ヌクレオヒストンの構造とその中での相互作用の推定 ……61
8　リボソームの構造とその中での相互作用の推定 ……62
9　ポリペプチド鎖延長因子 EF-Tu の他分子との相互作用の観測 ……64
文献 ……64

<相互作用の諸要素> ……67

4　静電的および疎水性相互作用と機能 ……伊勢　典夫…69

1　静電的相互作用 ……69
2　疎水性相互作用 ……73
3　高分子化合物の種々の機能と静電的相互作用および疎水性相互作用 ……82
3.1　可溶化現象 ……82
3.2　触媒作用 ……83
3.3　疎水性相互作用の近遠性と反応阻害作用，および疎液性相互作用 ……87
文献 ……89

5　高分子系の電荷移動相互作用，励起状態相互作用とその機能 ……田附　重夫…91

1　はじめに ……91
2　電荷移動，励起状態相互作用に関する基礎的な事項 ……92
2.1　電荷移動相互作用 ……92
2.2　励起状態相互作用 ……93
2.2.1　励起移動 ……93
2.2.2　Excimer と exciplex ……94
3　電荷移動相互作用 ……95
3.1　高分子であることの意味 ……95
3.2　高分子 CT 錯体における高分子効果とその解釈 ……96
3.2.1　ポリビニルカルバゾール(PVCz)および関連高分子 …… 99
3.2.2　ポリスチレン(PS)および誘導体 …102
3.2.3　非ビニル系高分子 ……103
3.3　高分子の化学構造と CT 錯体生成定数 ……104
4　励起状態における高分子の相互作用 ……105
4.1　励起移動 ……106
4.2　Excimer, exciplex 生成と高分子構造 ……107
5　CT 相互作用，励起状態相互作用による機能発現とその応用 ……113
5.1　高分子による選択的とり込み ……113
5.2　電導性，光電導性 ……114
5.3　励起移動の応用 ……116
5.4　感光性樹脂の設計 ……116
5.5　複合材料の可能性 ……117
文献 ……118

<特徴ある相互作用> ……123

6　選択性のある相互作用 ……竹本　喜一，稲木　良昭…125

1　はじめに ……125
2　モノマーの相互作用 ……125
2.1　核酸塩基の性質 ……125
2.1.1　核酸を構成する基本単位 ……126
2.1.2　核酸塩基の塩基性と互変異性 ……126
2.2　モノマー間相互作用 ……126
2.2.1　結晶中での相互作用 ……126
2.2.2　有機溶媒中での相互作用 ……127
2.2.3　水溶液中での相互作用 ……128
2.3　モノマー・ポリマー間相互作用 ……128
2.3.1　非相補的相互作用 ……128
2.3.2　相補的，協同的相互作用 ……129
3　オリゴマーの相互作用 ……130
3.1　分子内相互作用 ……130
3.2　分子間相互作用 ……132
3.2.1　有機溶媒中での相互作用 ……132

3.2.2　水溶液中での相互作用……132
3.3　オリゴマー・ポリマー分子間相互作用……132
4　ポリマーの相互作用……133
4.1　ポリヌクレオチド……133
4.1.1　ホモポリヌクレオチド……133
4.1.2　ポリヌクレオチド錯体……133
4.2　核酸塩基を含む合成高分子……134
5　イオンとの相互作用……135
6　選択的相互作用の応用……135
6.1　マトリックス反応……135
6.2　マトリックス重合……136
6.3　核酸塩基の分離……137
6.4　インターフェロン・インデューサー……138
文献……138

7　立体特異的な相互作用……井上　祥平…143
1　立体的相互作用の重要性……143
2　合成ポリペプチドの関与する不斉反応……145
2.1　ポリペプチド生成反応の立体化学……145
2.2　ポリペプチド末端の不斉触媒作用……146
2.3　ポリペプチドの側鎖における不斉反応……158
3　環状ペプチド……158
4　シクロデキストリン……150
4.1　フェニル置換位置に関する特異性……150
4.2　不斉反応……151
5　クラウン化合物……153
5.1　錯体形成における対掌体の選択……153
5.2　不斉反応……155
文献……156

8　酵素-基質相互作用……廣海啓太郎，外村弁一郎，中谷　博…159
1　はじめに……159
2　高分子基質との相互作用……160
3　酵素-基質相互作用の速度論……167
3.1　ズブチリシン BPN′ と SSI との結合反応……168
3.2　二段階機構……169
4　酵素-基質相互作用に伴う立体構造変化……171
4.1　リガンド側における構造変化……171
4.2　酵素側における構造変化……171
5　酵素-基質相互作用と触媒過程……173
5.1　リゾチーム……173
5.2　アミラーゼのサブサイト構造と作用様式……175
6　おわりに……178
文献……179

9　高分子と金属の錯体形成と機能……北條　舒正，白井　汪芳…183
1　はじめに……183
2　高分子の構造と錯体生成……184
2.1　高分子と金属イオンの溶液内錯体生成……182
4.2　分子内キレート橋かけの形成による安定化効果……184
2.3　分子内キレート生成の阻害と高分子構造……186
2.4　錯体生成における静電場の効果……189
2.5　不均一錯生成反応における高分子構造の影響……190
2.6　その他……191
3　錯体生成に伴う高分子構造の変化……191
3.1　溶液内錯体生成による高分子構造の変化……191
3.2　高分子フィルムの錯体生成に伴う構造変化……192
4　高分子-金属錯体の構造と機能……192
4.1　触媒機能……193
4.1.1　金属錯体部での直接的効果……193
4.1.2　高分子領域の環境効果……194
4.2　錯生成によって起こる高分子鎖の変化から直接発現する機能……195
5　おわりに……196
文献……196

10 高分子電解質間の相互作用……中島 章夫…199

1 コンプレックス・コアセルベーション……200
2 可撓性高分子電解質間の複合体形成……201
3 電解質多糖誘導体間の複合体形成……202
4 電解質ポリペプチドの複合体形成によるコンホーメーションの変化……205
5 複合体形成に与える成分高分子鎖の立体規則性の効果……207
文献……209