

# 中性子非干渉性散乱と分子シミュレーションによる生体分子のダイナミクスと水和構造の研究 Dynamics and hydration of bio-molecules studied by neutron incoherent scattering and molecular simulation

中川洋<sup>1,2</sup>

1 原子力機構-量子ビーム、2 JST-さきがけ

これまで、中性子非干渉性散乱実験と分子シミュレーションを組み合わせることで、生体分子の水和やダイナミクスの研究を行ってきた。生体分子の水和やダイナミクスの研究では、中性子を使うことで、“分子の熱揺らぎが分かる”、“水がよく見える”という、中性子の持つ量子ビームとしての特徴を活かした研究が行える。また分子シミュレーションで得られるトラジェクトリー(時々刻々と変化する原子の位置座標情報)からは、中性子散乱スペクトルが散乱強度も含めて定量的に計算できるため、両者の手法の組み合わせは相性が良い。水素原子からの強い非干渉性散乱を観測する生体分子や水和水の中性子非干渉性散乱では、得られるスペクトルは系全体の平均像である。特に、室温の生理的条件下での生体分子の非弾性散乱データは、準弾性散乱と振動スペクトルが同じエネルギー領域に重なり合うため、実験データからダイナミクスの情報を引き出すことが難しく、データの解釈はこれまであいまいな点が多かった。また非干渉性散乱は構造情報を本質的に含まないため、実験データを解析しているだけでは分子構造と対応付けてダイナミクスを解釈することが難しかった。これまで、このような実験手法が持つ弱点を、分子シミュレーションによる解釈による補足や、試料調製の工夫により克服することで、生命科学研究における中性子非弾性散乱の利用法を提示してきた。中性子散乱の実験データの解析に分子シミュレーションを援用することで、原子分解能で構造ダイナミクスの解析を行うという、実験と計算を相補的・相乗的に融合させた解析は、単に実験手法の持つ弱みを補うというだけでなく、実験データに潜在的に含まれている情報を引き出すという点においても有効である。本発表では、中性子散乱と分子シミュレーションを組み合わせた研究によって、生体分子の機能を支える構造揺らぎが、水和水との相互作用で発現する仕組みを解明した研究について紹介する。