

放射光 X 線と中性子を相補的に用いたタンパク質構造解析 Protein Structure Determination by Complementary Use of Synchrotron X-ray and Neutron Diffraction

○玉田 太郎、栗原 和男、大原 高志、安達 基泰、黒木 良太
(原子力機構・量子ビーム)

X 線回折が原子核を取り巻く電子からの現象であるのに対し、中性子回折は原子核そのものから生じる回折現象である。したがって、同じ原子を観測してもその位置や見え方に特徴的な差が生じる。水素原子の中性子散乱長は炭素や酸素原子などと同程度であるため、X 線結晶構造解析では 1Å 以上の高分解能でなければ決定できない水素原子の位置を、中性子結晶構造解析では通常の分解能 (2Å 程度) で容易に決定できる。原子力機構の研究用原子炉 JRR-3 には 2 台の生体高分子用中性子単結晶解析装置 (BIX-3, 4) が設置されており、これまでに PDB に登録された生体高分子の中性子構造 44 例のうち 16 例がこれら 2 台の装置を用いて解析されたものである (図 1)。また、中性子構造解析の際に X 線を相補的に用いることにより、中性子単独時よりも高精度での水素位置決定が可能となった。その際に、放射光を用いた高分解能かつ良質な X 線回折データ収集が重要であった。さらに、中性子と 1Å を上回る超高分解能 X 線解析結果を比較することにより、特殊な環境に存在するタンパク質 (酵素) の触媒基の電子状態と原子核の位置の違いから、タンパク質が関与するさまざまな生命反応をより深く理解することも目指している。本発表では、これまでに我々が中性子と X 線の双方を用いることにより構造決定に成功した創薬標的タンパク質 (酵素) の解析結果について紹介する。また、現在 BIX-3, 4 の 2 台の回折計を用いて年間に 7~14 構造の決定が可能であるが、解析数の向上および回折データの高分解能化を目的として、新規の試料ゴニオメータと組み合わせた窒素吹き付け低温装置を導入した。さらに、大強度陽子加速器施設 J-PARC への生体高分子専用回折計の設置準備にも取り組んでいる。これらの最新の状況についても併せて紹介したい。

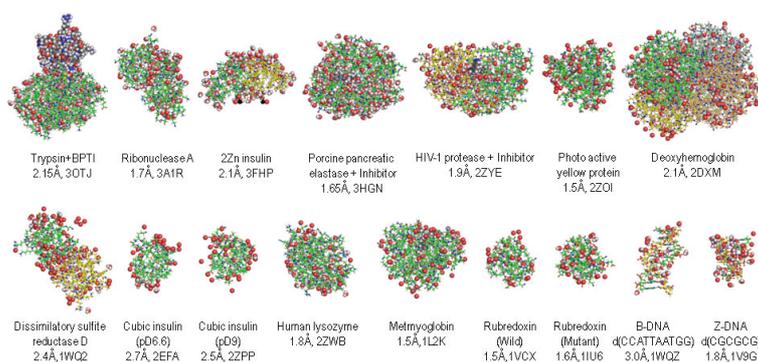


図 1. BIX-3, 4 を用いた構造決定した生体高分子の全原子構造 (PDB に登録済みの構造のみを描写)