

平成 24 年度第 2 回生物構造学研究会

主催：中性子産業利用推進協議会，茨城県中性子利用促進研究会，
J-PARC/MLF 利用者懇談会，（一財）総合科学研究機構(CROSS 東海)

共催：新世代研究所 水和ナノ構造研究会

協賛：SPring-8 利用推進協議会

開催日時：平成 25 年 3 月 21 日(木) 13:00-17:00

場所：研究社英語センター大会議室（p.3 を参照ください）

〒162-0825 新宿区神楽坂 1-2 TEL 03-3269-4331

http://www.kenkyusha.co.jp/modules/11_meetingroom/index.php?content_id=1

趣旨：J-PARC/MLF の茨城県生命物質構造解析装置(iBIX)には 2012 年度に第 3 世代の検出器を 30 台導入しました。加速器出力も 300kW に達すると、より高効率で生体反応に参与する水分子とプロトン移動の観測ならびに可視化情報を取得できるようになると期待されます。一方，JAEA では共用法の装置として大型タンパク質の結晶構造を解析できる生命科学専用中性子回折計ビームラインの建設を計画しています。この回折計が実現すると、格子長が 100Å を超えるような超分子タンパク質複合体結晶の測定も可能になり、ほとんどすべてのタンパク質の水素原子位置情報が獲得できるようになると期待されます。今回は、これら 2 台の装置の利用促進を図ることを目的として、両装置の現状を紹介するとともに、生物構造学における X 線(放射光)と中性子の相補性などについての情報交換を行います。

プログラム

13:00 開会挨拶 研究会主査 佐藤 衛（横浜市立大学）

13:05 J-PARC の現状と中性子の産業利用 林 眞琴（茨城県）

J-PARC/MLF の現状，および茨城県 BL の現状と得られた成果，ならびに，2013A における産業利用の課題採択結果などを紹介する。

13:25 チトクロム酸化酵素におけるプロトン移動と中性子結晶構造解析

－ その展望と問題点 －

月原富武（兵庫県立大学）

チトクロム酸化酵素は、酸素還元と同期したプロトン能動輸送によってエネルギーを生産する酵素である。我々は X 線結晶構造解析法によって原子レベルの機能メカニズムの解明に取り組んで来た。この研究はタンパク質場において展開される化学を介して酵素の働きの仕組みを理解する新しい研究分野を切り開くものである。X 線高分解能構造解析は順調に進んでおり、中性子線によってプロトン輸送機構の解明にとって必須である、水素原子位置の決定が緊要の課題になっている。

14:15 セルロース酵素分解と「水」の切っても切れない関係

五十嵐圭日子（東京大学）

セルロースは、植物細胞壁の約 50% を占めるグルコースのポリマーであり、地球上で最も豊富に存在するバイオマスである。自然界では、セルロース分解性の微生物が生産するセルラーゼによって加水分解されていることから、セルラーゼと水分子のインタラクションを理解することが、セルロース系バイオマスの利用には極めて重要であると言える。本講演ではセルラーゼの一分子観察、高解像度 X 線構造解析、中性子回折および分子動力学的解析の融合がもたらす新しいセルラーゼ像に関して議論する。

14:45～15:00 休憩

15:00 放射光によるタンパク質の超高分解能結晶構造解析

ならびに中性子回折法との相補利用

三木邦夫（京都大学）

近年の放射光技術の高度化によって、タンパク質の超高分解能結晶構造解析が可能になって

きている。タンパク質の結晶構造における水素原子位置決定や、従来、不可能と思われていた外殻電子の観測ができるようになり、タンパク質分子中の結合電子、孤立電子対、金属原子のd電子分布も可視化できる。それに相まって、中性子回折法による水素の原子核位置決定も重要度を増し、放射光と中性子の連携利用に大きな注目が集められている。

15:30 iBIX の現状 田中伊知朗 (茨城大学)

iBIX は J-PARC/MLF の BL03 に設置された生体高分子用高性能中性子回折装置であり、2008 年からユーザー利用に供されている。X線では測定が困難な、タンパク質の機能発現や化学反応に関与する水素や水分子を高精度で解析でき、従来装置の数十倍以上の測定効率を有する世界的にも貴重な高性能装置である。これまでは測定が困難であった小さな結晶でも測定が可能である。今年度、高性能な第3世代の検出器を16台増設するとともに、設置済みの14台をアップグレードした。その装置の現状とこれまでの測定例を中心に紹介する。

15:50 大型単位胞結晶をターゲットとした新しい

J-PARC タンパク質専用中性子回折装置 栗原和男 (原子力機構)

我々は J-PARC に膜タンパク質やタンパク質複合体などの大型単位胞結晶(格子長 250 Å)を測定可能にする中性子回折装置の建設を提案している(装置部会の最終審査合格済み)。本装置では、反射分離のため大面積検出器(1辺~500mm)を開発して L2 を長くし(800mm)、非結合型減速材を選択する。また、楕円ミラー集光系の採用や中型の単位胞結晶用の装置(格子長<120 Å)の併設も検討している。本装置では JRR-3 の BIX-3, BIX-4 の 20 倍以上の測定効率が期待される。

16:10 特殊環境微小単結晶中性子構造解析装置 SENJU の立上げと現状

大原高志 (CROSS)

SENJU は J-PARC/MLF の BL18 に新設された単結晶中性子回折計で、低温や高磁場、高圧といった極端環境下における無機、有機結晶の構造研究を主な目的としている。本発表では SENJU の装置としての特徴や iBIX との違いについて述べると共に、これまでに成功した 10K 以下での回折測定や 0.1mm³ という微小なタウリン単結晶の構造解析など SENJU で可能となる測定について紹介する。

16:30 分子性ナノ多孔質結晶に閉じ込められた構造水の科学

田所 誠 (東京理科大学)

分子性 1 次元ナノチャネル構造をもつ単結晶の作成に成功した。この単結晶内の水分子クラスターは 3 層構造を有し、融解-凝固の相転移挙動を示す。融解状態の中性子線結晶構造解析では、外壁に水素結合した水分子の構造は解析できたが、第 2 層目ではほとんど観察できず、第 3 層目では全く観測することができなかった。X線結晶構造解析による凝固状態との比較から、水と氷が混ざった中間層の構造を決めることに成功した。この中間層の水の運動は、24 時間スケールでゆっくりと動いており、熱的に観測された。また、この結晶の室温でのプロトン伝導は、~0.01S/cm で、燃料電池で使用されているナフィオン膜と同程度のプロトン伝導度を有することが分かった。

16:50 X線と中性子-X線でも見えるものと中性子でしか見れないもの-

佐藤 衛 (横浜市立大学)

1975 年 BNL で開催された、中性子回折関係の国際集会の基調講演において、Egelstaff は「中性子散乱実験は原理的には科学のすべての分野に応用できるし、重要な構造情報が得られる。しかし、その構造情報が他の手段でも得られるなら、それに中性子を用いるべきではない」と述べた。この指摘は、J-PARC が稼働して中性子が容易に利用できるようになった現在においても、中性子のセントラルドグマとして尊重しなければならない。本講演では、構造生物学研究において中性子を利用する意義について、これまでの X線および中性子を利用した構造生物学研究の経験と、J-PARC 中性子を使った生物構造学研究をチェックし、評価・取纏めを行う主査の立場から考えてみたい。

17:10 閉会挨拶 大橋 裕二 (茨城県)

懇親会：17:30～19:30

飯田橋駅近くの地ビールダイニング「ラ・カセット」で懇親会を開催します。参加費は¥2,000です。施設側とユーザーのぎっくばらんな意見の交換の場になりますので、是非ご参加ください。詳細はp.3をご参照ください。参加希望者は事前に登録してください。当日も受け付けます。会費は当日いただきます。

<参加申込み>

申込み先: 中性子産業利用推進協議会 事務局 桐原由美子

E-mail: info@j-neutron.com

(1)お名前, (2)ご所属先, (3)ご連絡先(電話番号, E-mail address), (4)懇親会への参加の有無をご記入の上メールにてお申込みください。

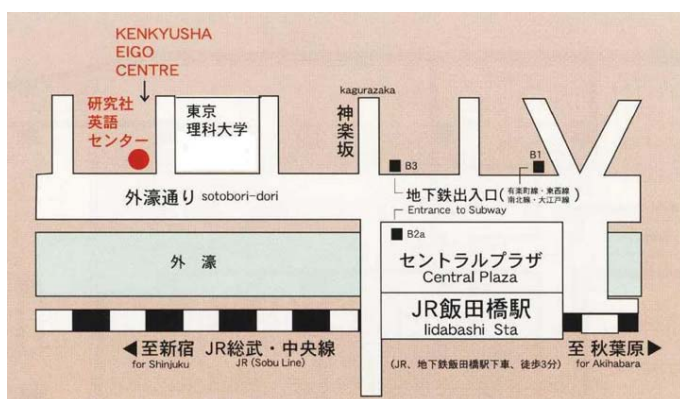
研究社英語センタービルへのアクセス

所在地: 〒162-0825 東京都新宿区神楽坂1-2

TEL :03-3269-4331 / 03-3260-9856

JR中央・総武線飯田橋駅西口徒歩約3分

東京メトロ南北線・有楽町線飯田橋駅 B2a, B3 出口徒歩約7分



懇親会のご案内

会費：2,000¥

時間：17:00～19:00

会場：神楽坂 ラ・カセット

(右の案内図を参照ください)

<http://la-cachette.co.jp/>

美味しい地ビールを楽しめるところです。

東京都新宿区神楽坂 1-10 三経第 22 ビル 3F

TEL: 03-3513-0823

