

創薬に貢献する中性子の現状と今後**Current status and future prospect on neutron scattering for drug development****開催趣旨:**

構造生物学において X 線回折・散乱の手法が中心的な役割を果たしていることは言を俟たない。しかしながら、X 線では、タンパク質の約半分を占める水素原子の観測は通常分解能においては実質不可能であるし、その動的な挙動を知ることも難しい。X 線が苦手とするこれら 2 つの観測を、前者については中性子回折が、後者については中性子非弾性・準弾性散乱によるダイナミクス解析が可能とする。これらの解析が可能な中性子源が国内には 2 つある。1 つはパルス中性子源である J-PARC、もう 1 つは研究用原子炉 JRR-3 で、前者は来年度にフル出力運転が、後者は約 10 年ぶりの再稼働が予定されている。この時宜を得て、本セッションでは中性子の特長および現状と今後の創薬への貢献の可能性について、3 名の先生方からご講演いただき、議論を深めたいと考えている。

モデレーター: 玉田 太郎 Taro Tamada

量子科学技術研究開発機構

National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

1. 茨城県生命物質構造解析装置 iBIX による蛋白質中性子構造解析一現状、成果及び今後の展望

日下 勝弘 Katsuhiko Kusaka

茨城大学 Ibaraki University

単結晶中性子回折法は、X 線との相補的な利用により生体高分子中の水素原子やプロトン化状態について高精度な情報を得ることができる手法であり、生体高分子の分子認識や化学反応機構解明に対して重要な知見を与えることが期待される。本講演では、ハイスループットな中性子構造解析を実現するために開発された iBIX の現状、中性子構造解析の特徴を生かし iBIX によって得られた研究成果及び、その将来展望を紹介する。

2. 中性子非弾性・準弾性散乱と分子シミュレーションによる蛋白質ダイナミクスの解析

中川 洋 Hiroshi Nakagawa

日本原子力研究開発機構 Japan Atomic Energy Agency

中性子非弾性・準弾性散乱は、中性子と分子とのエネルギーのやり取りを計測することにより分子ダイナミクスを解析する分光法の一つである。この手法で得られる分子ダイナミクスの時空間スケールは、分子シミュレーションと重なるため、両者の手法を相補的・相乗的に用いた蛋白質ダイナミクスの解析は有効である。本講演では、中性子線を用いた蛋白質ダイナミクスの研究を紹介する。

3. 創薬標的タンパク質の中性子線結晶構造解析

木下 豊 Takayoshi Kinoshita

大阪府立大学 Osaka Prefecture University

創薬標的タンパク質の X 線結晶構造解析は、今や創薬研究に欠くことのできない技術である。しかしながら、薬物候補化合物との相互作用を精密に解析するうえで重要となる水素原子の位置決定には原理上の限界がある。一方、中性子線を利用した場合には、水素原子の位置をたやすく決めることができる。本講演では、我々の関わった中性子線構造解析の例を紹介し、創薬への応用を議論する。