

動きを見つめる中性子

—活性サイトの水素からドメイン相関・解離会合まで— Neutron Probing Dynamics of Biomolecules, *from Hydrogen at Active Site to Domain Correlation*

開催趣旨:

「中性子」と聞いて、皆さんは何が浮かべられるでしょうか?もし「水素を見る手法」というイメージが浮かべてくださった方がおられたら「中性子」にお詳しい方です。しかし、現在の中性子散乱・回折法は水素を見るだけではありません。X線には無い同位体効果・スピンさらにエネルギーレンジの特性を生かして、生体高分子における活性サイトの水素からドメイン相関・解離会合までを捉える手法として発展しつつあります。これには近年、J-PARCをはじめとする世界中で建設・運用が開始された高強度中性子源における高精度分光器の開発と測定データを可視化する計算機科学による解析法の発展が大いに寄与しています。そこで、本セッションでは、中性子科学と計算機科学の最先端で研究を展開している方を講師にお呼びし、最新の中性子回折・散乱の成果と計算機科学を用いた中性子データの解析法を紹介していただきます。そして、皆さんと「中性子で何が見えるか?」を共有し、発展途上である「中性子構造生物学」の今後について議論させて頂きたいと考えております。

モデレーター: 杉山 正明 Masaaki Sugiyama
京都大学 Kyoto University

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. 酵素の基質特異性に関わる水素原子の観察

中村 照也 Teruya Nakamura
熊本大学 Kumamoto University

酵素は生命現象において重要な化学反応を触媒するタンパク質であり、その基質認識・反応機構を真に原子レベルで理解するには、酵素活性部位の水素原子を実験的に観察することが必要不可欠である。本講演では、高分解能 X 線・中性子結晶構造解析により明らかにした水素原子が関与する酵素の幅広い基質特異性の構造学的基盤について紹介する。

2. コントラスト変調小角中性子散乱によるタンパク質複合体の解離会合現象の可視化

井上 倫太郎 Rintaro Inoue
京都大学 Kyoto University

中性子散乱における一つの大きな特徴として同位体識別能が挙げられ、特に生体高分子に多く含まれる水素において絶大な威力を発揮する。この特徴を生かすことで、生体高分子複合体において特定の生体高分子のみの可視化できるコントラスト変調法が可能となる。本講演では、この手法を積極的に活用することで特にタンパク質複合体の解離会合現象の可視化法について紹介する。

3. 中性子散乱データを活用した超分子のモデリング

河野 秀俊 Hidetoshi Kono
量子科学技術研究開発機構
National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

複数のタンパク質や核酸から構成される超分子の立体構造の決定は依然として難しい。構成要素分子個々の立体構造が分かっていたとしても、それらがどのように空間的に配置されているのか、また、相互作用によってどのように構造変形をするのか、といったことを考慮しての分子モデリングは、膨大な計算量を要する。X線・中性子散乱データは、計算から出てきた候補モデルを絞り込みに有効である。本講演では、X線・中性子散乱データを活用した超分子のモデリング方法と構築したモデルの評価について我々のアプローチを紹介する。