

生体高分子用中性子単結晶回折装置 BIX の現状と今後

量研量子生命

玉田太郎, 栗原和男

Current Status and Future plan of Neutron Diffractometers
for Biological Macromolecules, BIX-3 and 4

iQLS. QST

T. Tamada and K. Kurihara

量研は炉室 1G ポートに 2 台の生体物質構造解析装置 (BIX-3 および BIX-4) を設置している。2 台の装置は Si 完全結晶を水平方向にベントしたモノクロメータと中性子イメージングプレートから構成され、その基本的性能は同じである。生体高分子用としては Si(111) を用いており、BIX-3 では 2.9Å、BIX-4 では 2.6Å に単色化された中性子を利用するが、Si(311)に交換することで低分子の回折実験にも適応可能である。BIX は格子定数 100Å 程度までの結晶を対象とし、最高で $d=1.5 \text{ \AA}$ (BIX-3)、 1.4 \AA (BIX-4) の分解能で測定することが可能である。2 台の装置は 2002 年から生体高分子結晶の中性子回折データ収集に供され、これまでに計 21 個の立体構造がデータベース (PDB) に登録されている。現在、全世界で 170 個の中性子構造が PDB に登録されているが、JRR-3 が稼働していた 2010 年時点では BIX が全世界の約半数の構造決定を担っていた。このように「量」の点では世界に後れを取っている状況であるが、「質」の点では単色中性子の利用という特色から分解能および統計値の双方で今なお世界でも最高水準にあると言える。

本発表では、上記の BIX の特徴に加えて、これまでに BIX を用いて構造決定された代表例として 2 つのタンパク質の構造解析結果について紹介する。1 つはセリンプロテアーゼの 1 種であるエラスターゼ (PPE) と阻害剤複合体、もう 1 つは光受容タンパク質であるイェロープロテイン (PYP) の構造解析で、前者では反応中間体におけるオキシアニオンホールの状態を、後者では発色団との間に形成された低障壁水素結合を、水素原子の直接観察により明らかにした (図)。さらに、JRR-3 再稼働に向けた高度化の取り組みについても紹介する。上述の Si(111)と Si(311)の交換については、自動切換えシステムの実装のめどはついている。さらに、より大きい格子からの回折データ収集を実現するために、2 台のうち 1 台をガイドホールに移設し、多様な波長を選択可能なシステムを導入したいと考えている。これらが実現することで解析対象は飛躍的に広がり、「質」「量」共に世界最高性能の装置になることが期待される。

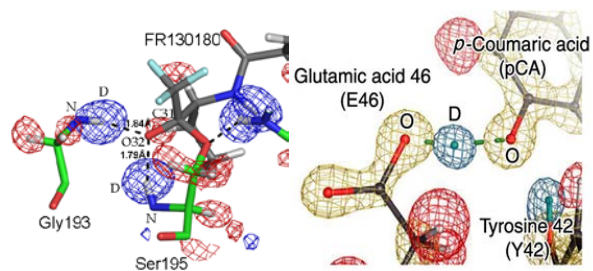


図: BIX を用いて明らかになったタンパク質の活性中心の様子 (左: PPE、右: PYP)