

 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report
課題番号 Project No. 2009BX0003 実験課題名 Title of experiment アミノ酸・核酸類の中性子線結晶構造解析 実験責任者名 Name of principal investigator 鈴木栄一郎 所属 Affiliation 味の素株式会社ライフサイエンス研究所	装置責任者 Name of responsible person 田中伊知朗 装置名 Name of Instrument/(BL No.) iBIX (BL03) 実施日 Date of Experiment 2010年1月28日～2月2日

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
 Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

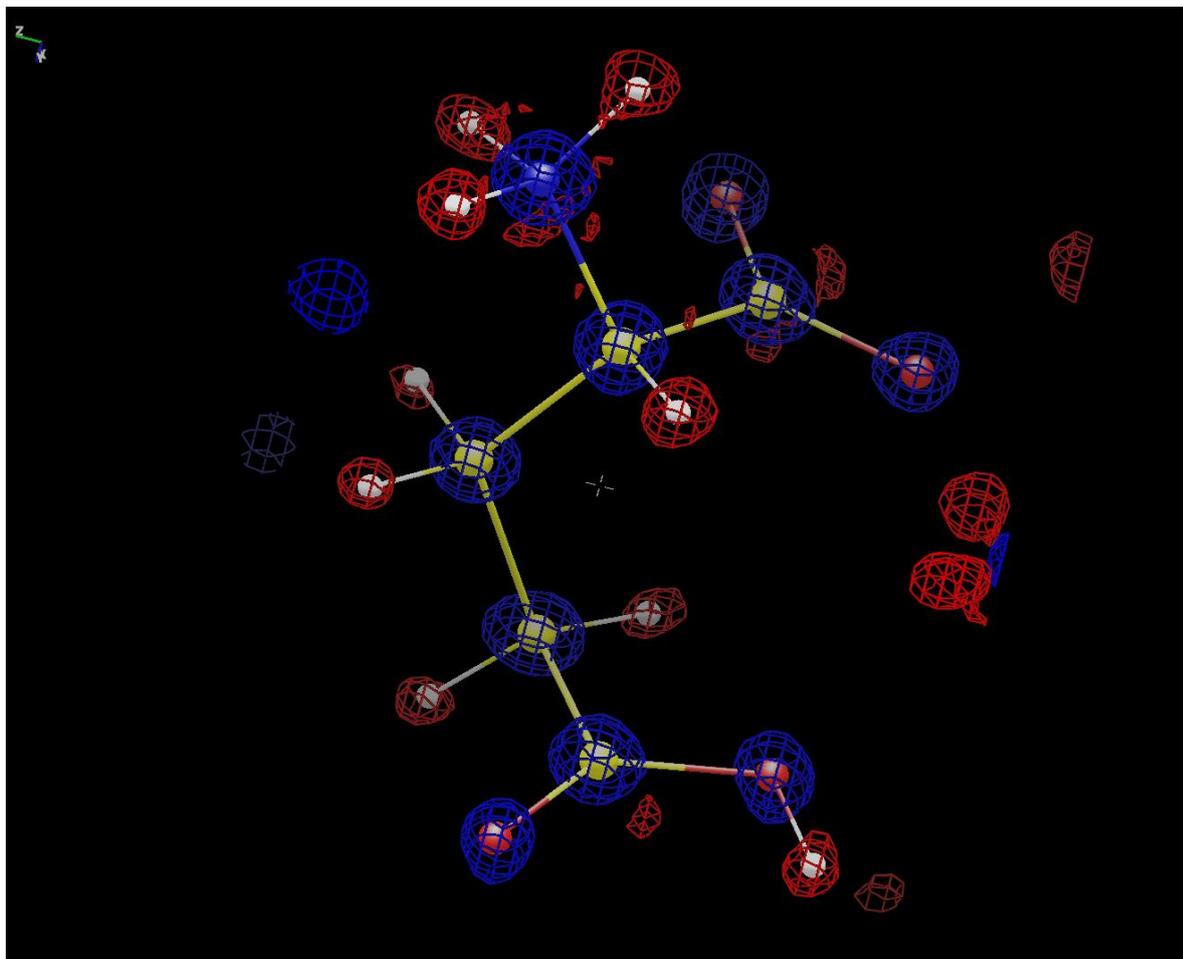
1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form.
<p> L-グルタミン酸結晶 (α相) ・サイズ: 約 6mm³ </p>  <p>・写真:</p>

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。)
<p>Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.</p> <p> グルタミン酸塩が昆布だしの主要呈味成分であることが、東京帝国大学の池田菊苗博士により見出されてから、100年余が経過した。博士は、これを「うま味」と呼び、調味料を発明したが、この業績は日本の十大発明のひとつにも挙げられている。現在においても、「うま味調味料」は世界中で消費量が伸びている。グルタミン酸はアミノ酸の一種であるが、多くのアミノ酸は、食品以外にも、家畜用飼料、医薬品原料等、幅広く利用されている。こうしたアミノ酸製品の多くは、結晶の形態をとっているため、アミノ酸製品を生産する上で、その結晶の構造・機能・物性に関する知見は様々な局面で非常に重要であり、単結晶構造解析、粉末回折は必要不可欠な分析技術となっている。水素原子が明瞭に観察できる中性子線構造解析を実施すれば、結晶内でのイオン化状態や水和状態の精確な解析が可能となり、晶析技術高度化等の産業応用に活用できる。 </p> <p> J-PARC の iBIX を利用して、グルタミン酸 α 相の結晶構造解析を実施した。測定時点での J-PARC 出力は 120kW で、最終的なスペックの約 10 分の 1 であったにもかかわらず、以前に同結晶を原子炉のビームラインで測定したときの約半分のマシンタイム(102 時間)で 0.6 Å 分解能程度の良質なデータを取得し、中性子線結晶構造解析に成功した。水素原子は非等方性温度因子で精密化出来た。結晶構造中では、既報の通り、グルタミン酸の δ カルボキシル基がプロトン化された状態になっており、隣接分子の α カルボキシル基と </p>

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

強い水素結合を形成していた。

今回の利用の結果、食品、アミノ酸、医薬品等、幅広い事業分野で、有機低分子の中性子線結晶構造解析が、有力な分析手段になっていくであろうと期待された。また中性子線回折の原子核密度の特徴(水素原子が負、重水素や他の多くの原子が正)を、うまく活用すれば、幅広い分析や構造解析への応用展開が可能であろうと考えられた。



グルタミン酸 α 晶の結晶構造と原子核密度分布図

青で示した部分が正の密度分布($+3\sigma$)、赤で示した部分が負の密度分布(-3σ)である。 γ カルボキシル基がプロトネーションされた状態になっている。