

2022年度第1回（第30回）iBIX研究会

主 催：茨城県中性子利用研究会
共 催：中性子産業利用推進協議会
J-PARC MLF 利用者懇談会

開催日時：2022年9月20日(火) 13:30-15:30

場 所：オンライン開催

参加費：無料

趣 旨：

本年度は J-PARC の加速器出力が定常的に 800kW（最高出力 1000kW）で安定した運転が実現しており、茨城県生命物質構造解析装置「iBIX」もフルスペックに近い効率での測定が可能となってきています。タンパク質の水素やプロトンを観測できる中性子の長所を生かしたプロトン互変異性の存在を示す例も報告され注目されています。また、水素結合の観測、骨格構造から決定できないアミノ酸残基の側鎖の水素原子の配向、骨格 N-H から N-D の変換により示されるタンパク質の内部に侵入する水 D_2O の存在等興味ある結果が次々と報告されております。

iBIX 研究会の開催目的は、iBIX を今後利用しようと考えておられる方の参考にしていただくための議論の場を提供することです。今回の研究会では、理化学研究所 放射光科学研究センターの杉本 宏氏に中性子・XFEL・シンクロトロンを利用したヘムタンパク質の精密構造解析についてご紹介いただきます。タンパク質の結晶構造解析にご関心をお持ちの皆さまの参加をお待ちしています。

プログラム：

幹事 今野 美智子（茨城県）

司会 田中 伊知朗（茨城大学）

13:30～13:35 開会挨拶 研究会主査 日下 勝弘（茨城大学）

13:35～14:30

講師：杉本 宏（理化学研究所 放射光科学研究センター 専任研究員）

題目：中性子・XFEL・シンクロトロン結晶学を駆使したヘムタンパク質の精密構造解析

概要：

タンパク質の機能発現には水素原子のダイナミクスが深く関与している。そのメカニズムを明らかにするためには高分解能でタンパク質の立体構造を解析しなければならない。その例として次の2つを挙げる。(1) ペルオキシダーゼというヘム酵素では活性中心の Fe(II) に O_2 が結合し、高酸化状態の Fe(IV) を経由して酸化反応を触媒する機構が提案されてきた。半世紀の歴史がある構造・分光解析では明らかにできなかった化学的な性質を、中性子や SACLA の XFEL による

高分解能データから明らかにした。(2) 病原菌がもつ HasA というタンパク質は、鉄源として宿主からヘムを奪うために機能している。その超高分解能のX線構造解析を進めていくと、ヘム鉄のリガンドの His 残基には特殊な水素結合があり、Fe の酸化還元状態によって水素原子の位置が変化していることを見い出した。中性子回折データ (分解能 1.56 Å) と XFEL データ (分解能 0.85Å) の双方の特徴を生かした構造解析から得られた知見を紹介する。

14:30~15:30 講演者を中心に議論

<参加申込み>

参加をご希望の方は下記申込フォームから 9 月 15 日 (木) までにお申し込みください (定員になり次第締め切ります)。

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLScWxUfPyjTTnvhi9T4K-YL_0_cSOWc10DHv7LZmcKU430aWQ/viewform

入力いただいたメールアドレスにお申し込み確認のメールが自動的に送信されます。申し込みフォームからお申し込みできない場合は、メールにてお申し込みください。

メール申し込み先:

茨城県中性子利用研究会事務局 田中志穂 (tanaka@ibaraki-neutrons.jp)

(1) 名前, (2) 所属, (3) 連絡先 (E-mail address) をご記入の上, メールにてお申し込みください。

申し込みされた方には, Zoom 接続に必要な情報 (URL, ログイン ID, パスワード等) について, 開催前にメールでお知らせします。