

## 2019 年度第 2 回(第 25 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

新世代研究所 水和ナノ構造研究会

東海地区中性子生命科学検討会

日時： 2019 年 12 月 4 日 (水) 13:20-15:20

場所： いばらき量子ビーム研究センターC104 号室

〒319-1106 茨城県那珂郡東海村大字白方 162 番地 1

<https://www.pref.ibaraki.jp/sangyo/kagaku/tyusei/bl-top.html>

趣旨：

茨城県生命物質構造解析装置「iBIX」では格子定数が  $135\text{\AA}^3$  の結晶の構造解析が可能であることが示されました。また、J-PARC センターとの契約を更新し、今後 10 年間、タンパク質結晶構造解析装置として存続することとなりました。引き続き、タンパク質の水素やプロトンを観測できる中性子の特長を生かし、科学的意義があり、独自性のある研究として、1. ケト型—エノール型互変異性に代表される多種のプロトン互変異性の存在、2. 水素結合の観測、3. 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等の研究を推進する計画です。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が iBIX 研究会の開催目的です。今回の研究会では、大阪大学薬学研究科 福田庸太先生に亜硝酸を一酸化窒素へ変換する酵素である銅含有亜硝酸還元酵素 (CuNIR) の反応機構解明に向けた研究についてご紹介頂き、中性子構造解析において何を知らうとしているのか、また現状で何を知らうことができたかをお話しして頂きます。タンパク質の中性子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 山田 太郎 (茨城大学)

13:20～13:25 開会挨拶 研究会主査 日下 勝弘 (茨城大学)

13:25～14:20

講師： 福田 庸太 (大阪大学薬学研究科)

題目： 銅含有亜硝酸還元酵素の反応機構解明に向けた高分解能中性子線結晶構造解析

要旨：

銅含有亜硝酸還元酵素 (CuNIR) は亜硝酸を一酸化窒素へ変換する酵素で、窒素循環において重要な役割を担う。過去 30 年近く、放射光や XFEL の利用も含めた X 線構造解析が行われてきたが、プロトン移動を伴う CuNIR の反応機構解明には至っていない。講演者らは先ごろ、iBIX を用いて CuNIR の中性子線構造を 1.5 Å 分解能で決定し、触媒残基や溶媒のプロトン化状態を高精度で可視化した。その結果、低 pH 環境下でも、従来実験科学者たちが想定していた H<sub>2</sub>O ではなく、OH が、活性中心の銅イオン上に安定して存在できることが判明した。本講演ではこうした中性子線解析だからこそ得られた新規な結果の詳細を報告する。

14:20～15:20

講演者を中心に議論

<参加申込み>

参加を希望される方は下記までメールにてお申し込みください。

申込み先： 茨城県中性子利用研究会事務局 田中 志穂

E-mail : [tanaka@ibaraki-neutrons.jp](mailto:tanaka@ibaraki-neutrons.jp)

(1)お名前、(2)ご所属先、(3)ご連絡先(E-mail address) をご記入の上、11月29日(金)までにお申し込み下さい。