

量子技術を適用した生命科学基盤の創出  
平成 29 年度採択研究者

2018 年度 実績報告書
------------------

平野 優

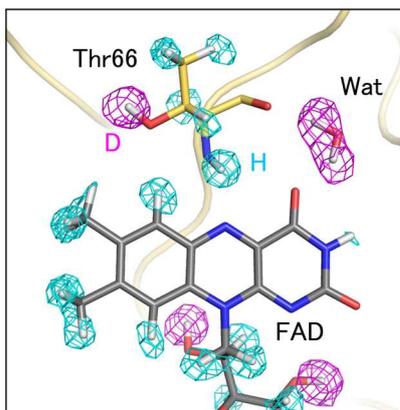
量子科学技術研究開発機構 量子ビーム科学研究部門  
主幹研究員

## 高分解能立体構造解析によるタンパク質における量子現象の解析

### § 1. 研究成果の概要

タンパク質において水素原子は触媒反応や酸化還元反応、外殻電子は原子間の結合や電子伝達反応などに直接関与しており、そのような化学反応においては、古典的な遷移状態理論で説明できない水素原子や外殻電子のふるまいから、量子トンネル効果が寄与していると考えられている。水素移動反応において水素結合ネットワークが重要な役割を担っていると考えられており、タンパク質を構成するアミノ酸だけでなく結合する水分子や補酵素などの水素原子を含めた立体構造情報を取得することは、水素原子を介した化学反応を理解する上で重要な課題となっている。2018 年度は、研究対象として用いる酸化還元タンパク質 NADH-シトクロム  $b_5$ 還元酵素 (b5R) における水素原子を含めた水素結合ネットワークを明らかにするために、中性子回折と X 線回折による高分解能の立体構造解析を実施した。

b5R の中性子構造解析は、生化学的な実験から示された酸化反応速度の大きく変化する 2 種類の pH 条件において実施した。その結果、b5R に結合する補酵素 FAD からタンパク質表面に繋がる水素結合ネットワークにおいて 2 つの条件で決定した立体構造の間で差が観測された。また、これまで水素原子の情報を含めた立体構造解析が行われていなかった補酵素 NADH を結合した還元型 b5R について、試料調製条件および結晶化条件の検討を行うことで良質な結晶作製に成功し、高分解能の X 線回折データを取得することが可能となった。その結果、水素移動反応に重要と考えられる補酵素間の配置および水素結合ネットワークの情報を取得することができた。



中性子構造解析により決定した b5R の補酵素 (FAD) と周辺のアミノ酸 (Thr66) と水分子 (Wat) の水素原子位置  
水色は軽水素、ピンク色は重水素の散乱密度を示している

## § 2. 研究実施体制

- ① 研究者: 平野 優 (量子科学技術研究開発機構 量子ビーム科学研究部門 主幹研究員)
- ② 研究項目
  - (1) 良質な結晶作製
  - (2) 高分解能回折データ収集
  - (3) 高分解能立体構造解析