

平野 優

量子科学技術研究開発機構量子生命科学領域
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

タンパク質は、生体内における代謝などの化学反応、物質の輸送・貯蔵、免疫といった生命活動を支える多様な機能を有している。タンパク質分子の全原子数の約半数を占める水素原子は、生体分子の主要な構成要素であるだけでなく、触媒反応や酸化還元反応などにおける水素移動反応に直接関与する原子である。また、原子中の外殻電子は、原子の電荷や電子移動反応などタンパク質の分子機能に直接関与している。酸化還元反応を触媒するタンパク質の関与する水素移動反応や電子移動反応においては、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する可能性が示されている。そのため酸化還元タンパク質の水素原子および外殻電子を含めた高精度の立体構造情報を取得することは、水素移動反応および電子移動反応における量子トンネル効果の寄与を理解する上で重要な課題となっている。

2019 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) における水素移動反応に関与する還元状態について中性子回折データ収集に初めて成功し、水素移動反応における量子トンネル効果の寄与の理解につながる立体構造情報取得が可能となった。還元型 b5R は酸素存在下で非常に不安定であるため、無酸素環境下で結晶化条件の最適化を実施し、中性子回折データ収集可能な体積 1 mm^3 を超える大型結晶を取得することが可能となった。また、一週間以上の長期間の回折データ収集期間中、還元型を安定に保持するため、結晶周囲の無酸素環境を保持した状態での回折データ収集法を確立した。ドイツの研究用原子炉 FRM II の生体分子用回折装置 BIODIFF を利用した中性子回折実験の結果、 2 \AA 分解能を超える回折データセット取得に成功した。

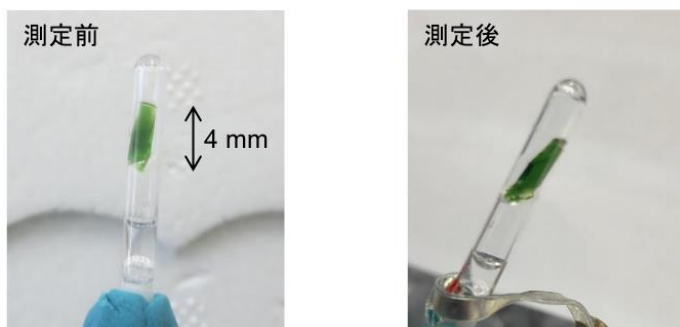


図1 還元型 b5R の大型結晶写真

還元型 b5R 結晶は緑色を呈するが、酸素の混入などにより酸化されると黄色に変色する。中性子回折実験の期間(14日間)において、還元型を保持した状態での完全なデータセット取得が可能となった。