

プロジェクト名(タイトル):

生命分子の実験的制限付き構造決定

利用者氏名:山崎俊夫(1)

理研における所属研究室名:

(1) 生命機能科学研究センター 構造 NMR 技術研究ユニット

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

核磁気共鳴(NMR)から得られる生体分子の各原子まわりの情報は生体分子の構造やそのダイナミクスと機能の関係を解明するうえで有用である。特に、結晶化できない柔らかい状態、動きのある状態での解析には NMR は不可欠である。もっとも基本的な各原子の情報は化学シフト(chemical shift)と呼ばれる、共鳴信号の周波数の主磁場に対する比である。構造依存性があるので、仮定した構造の妥当性を調べることに使われる。

NMR に使われる HTS(高温超電導体)磁石の磁場解析を補助的に行った。Tape 状導体が遮蔽電流を面内に流すので、磁場が歪む。quench などの磁場変動時に発熱の原因になり、quench 伝播の計算にも必要である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

quantum espresso の package を使って、構造から電子分布を求める。Density functional theory と plane wave による展開を使うことによって、比較的大きな分子での計算が可能になっている。gipaw (gauge including projector augmented waves)法により NMR 化学シフトを計算した。

低分子結晶の場合と、タンパク質を分割した場合の計算を進めている。

磁場解析 program は自力開発である。電流と磁場の方程式に基づいて、時間変化を求めることができた。クエンチ過程での電流変化を与えた場合の渦電流由来の発熱計算を行った。Coil の中では、tape が重なっているため、お互いに協力して磁場の変化を抑制するので、磁場変化による発熱は小さくなる。しかし、coil の上端などに tape 線材が単独で存在しているところが危険になる。

3. 結果

膜たんぱく質中、Tyr 残基の OH, Trp 残基の ring-NH, Glu 残基の COOH などの中で、水素結合ネットワークで安定化されたものが、NMR で観測された。目的原子とその周り 5 Å 以内の原子(残基単位)を取り出し、NMR 化学シフトの計算を行った。構造変化に伴い、化学シフトが変わることが計算でも再現された。

1300MHz NMR 磁石開発で、HTS 線材が quench で焼損しない条件を探す計算を行った。HTS 電流を早く減少させることで、焼損を避けられることが分かった。しかし、quench 起点によっては、LTS コイルの温度が上がる場合があり、quench heater で常伝導化を促進することも必要であることが分かった。

4. まとめ

タンパク質において、化学シフトから水素結合の強さを導き出すことができた。多数組み合わせることで、全体構造を推定できると期待する。得に、光を受けた時の励起状態の構造を知ることが望みである。

5. 今後の計画・展望

タンパク質全体の構造変化を解析したい。
1300 MHz NMR 磁石の開発に寄与したい。

6. 利用がなかった場合の理由