



BIX-3、BIX-4

(Diffractometer for Biological Crystallography)

生体高分子用中性子単結晶回折装置-3、4

タンパク質や DNA など
生体高分子の立体構造の決定

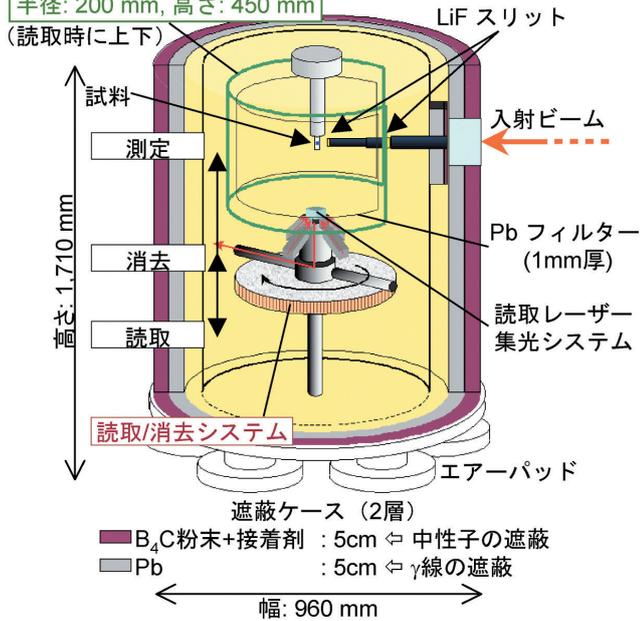
概要

BIX-3 及び BIX-4 は、タンパク質や DNA など生体高分子を測定対象としている単結晶中性子回折装置です。本装置の主な目的は、結晶構造解析により生体高分子内及びその分子周囲を囲んでいる水和した水（水和水）分子中の水素原子位置を決定することです。水素原子及び水和水分子は様々な生体反応プロセスで重要な役割を果たしています。また、水和水分子の配向（水素の向き）も、タンパク質と他の物質の相互作用や着脱などに影響を与えています。

装置の特長は以下の通りです。(1) 中性子を集光して試料位置での強度を増加させるモノクロメータを用いています。(2) 検出器として、熱中性子に対して高い検出効率を持ち、大面積の検出面を持つ中性子イメージングプレート（NIP）を採用しています。(3) 高いシグナル／ノイズ比を得るため、ラウエ法ではなく単色中性子を利用する方法を用いています。

これまでに報告されているタンパク質の中性子構造の約半数は、両装置によって測定されています。低温装置の導入により、試料からの回折強度の増大や決定される原子位置精度の向上が見込まれるなど、現在も更なる性能向上が図られています。

中性子イメージングプレート
半径: 200 mm, 高さ: 450 mm
(読取時に上下)



装置	BIX-3	BIX-4
モノクロメータ	弾性湾曲シリコン完全結晶 Si (111) / Si (311)* (* 低分子モード: BIX-3のみ)	
モノクロメータサイズ	長さ250 × 高さ40(中央), 20(上下) × 厚さ10mm(2.5mm厚 × 4枚)	
集光機構	水平方向: 弾性湾曲(曲率 4.1m) 鉛直方向: 結晶3枚組, 上下傾斜可	
波長	0.26nm	0.29nm / 0.151nm
モノクロメータ・試料間距離	2.25m	1.8m
試料位置中性子強度(111の場合)	3×10^6 neutrons/cm ² /sec	2.4×10^6 neutrons/cm ² /sec
波長分散 ($\Delta \lambda / \lambda$)	0.023	0.023 / 0.034
試料直前スリット径	φ1, 2, 3, 5 mm	
検出器	中性子イメージングプレート(富士写真フイルム社製 D55-200)	
有感面積	450 × 980 mm	
2θ ₀ 範囲	±143°	
位置分解能	0.2 mm または 0.4 mm (2モード)	
最小d-spacing (赤道線上)	0.138nm	0.153nm / 0.08nm
アクセサリ	窒素ガス吹付け型低温装置(100K)	

利用研究例

タンパク質の表面には、水素の結合・解離により電荷を持つアミノ酸が存在し、酵素反応中の触媒活性の発現に深く関わっているものがあります。これらのメカニズムの解明に、中性子構造解析が非常に有益な情報を与えます。

図1は、ヒト免疫不全ウイルス(HIV)プロテアーゼとその阻害剤の複合体に対する中性子構造解析結果です。等価なはずの2つの触媒基(アスパラギン酸)が1つは解離型、もう一方は非解離型として存在していることが初めて示され、触媒反応機構を明らかにすることができました。

図2には、ブタ膵臓エラスターゼと阻害剤の中性子構造解析結果が示されています。セリンプロテアーゼに共通する触媒基の解離状態の観測に成功するとともに、オキシアニオンホール(酸素陰イオンホール)という特殊な立体構造が直接観測されました。

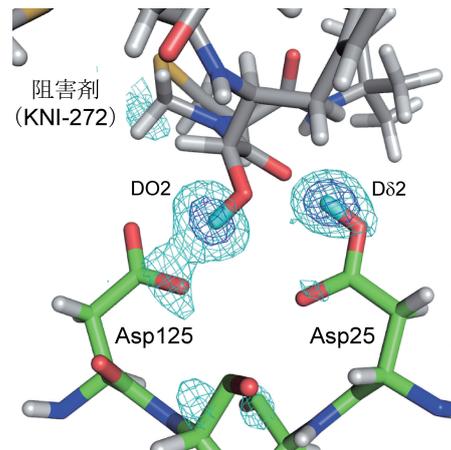


図1 ヒト免疫不全ウイルス(HIV)プロテアーゼとその阻害剤の中性子構造解析結果

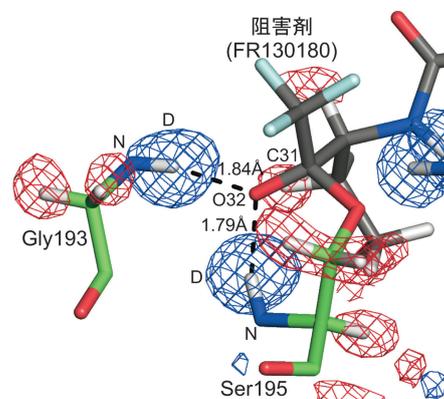


図2 ブタ膵臓エラスターゼと阻害剤の中性子構造解析結果