

提出 2011 年 2 月 7 日

## 会合議事録

研究会名：2010 年度 第一回高分子科学研究会

日 時：2010 年 11 月 6 日（土） 午後 1 時 10 分～午後 5 時 30 分

場 所：中央管理棟 上坪講堂

出席者：（議事録記載者に下線）計 20 名

議 題： 広角、小角 X 線散乱データ解析のための計算機シミュレーション技術の展開

議事内容：

放射光の利用により高分子の広角・小角 X 線散乱データの質が向上している現状において、さらに精度高く、かつ定量的にデータ解析を行うことが益々重要になっている。そこで、計算機シミュレーションを解析に活用している三名の講師による最新の解析事例について報告と質疑応答を実施した。

（1）時計タンパク質の構造変化と小角 X 線散乱測定による実時間解析

名古屋大学大学院理学研究科 秋山 修志 博士

溶液中におけるタンパク質の携帯や挙動を調べる手法として小角 X 線散乱は極めて強力であるが、分解能は広角 X 線散乱による結晶構造解析には及ばない。しかし、最近開発されたコンピューターシミュレーションプログラムは、実測散乱パターンを再現するようにタンパク質の構造をかなり詳細に教えてくれる。本講演では、まず、その手法についてのデモンストレーションが行われた。

シアノバクテリアの生物時計に関与する 3 種類のタンパク質 KaiA、KaiB、KaiC を、試験管の中でアデノシン 3 リン酸（ATP）と混合すると、リン酸化型 KaiC と脱リン酸化型 KaiC の濃度が 24 時間周期で変動することが知られている。このタンパク質の構造に内包された生物時計のメカニズムを解明するには、3 種のタンパク質の複合状態を明らかにすることが重要である。個別のタンパク質の構造は結晶構造解析より明らかにされているが、溶液中で動的に変動する複合体構造を広角 X 線回折の分解能で明らかにすることは容易ではない。一方、外形既知の散乱物体数種が複合した複合散乱体における形態の差異は、小角 X 線散乱の分解能でも十分に検出することができる。第一原理計算に基づく散乱シ

ミュレーションを駆使して、シアノバクテリアの時計タンパク質の複合構造を明らかにした鮮やかな手法は、小角散乱を用いたダイナミクス計測の可能性を強く感じさせるものであった。

(2) 1次元、2次元小角 X 線散乱パターンに基づく高分子高次組織解析  
京都大学大学院工学研究科 竹中 幹人 博士

小角 X 線散乱法に関して、実験法の基礎や注意点、そして解析理論の説明に関して具体例を挙げながら懇切丁寧に解説された。例えば、粉末状の試料から発生する全反射が検出器に深刻なダメージを与える事例とその対策、実験セルの窓材に用いるフィルムの選定など、実践的な内容がふんだんに盛り込まれており、実際に SPring-8 など放射光施設を利用している研究者にとって有用な講演であった。高分子の構造解析に必要な基礎理論についても詳しく説明され、聴衆の理解も深まった。また、Unified Guinier/Power-law Approach など比較的新しい解析理論の有用性および注意点について参加者を含めた意見交換がなされた。

(3) 低分子および高分子結晶の X 線構造解析におけるシミュレーション技法  
豊田工業大学極限材料専攻 田代 孝二 博士

広角 X 線回折法とコンピューターシミュレーションの併用による高分子結晶の精密構造解析に関して、実際にソフトウェアのデモンストレーションを行いながらの実践的な解説がなされた。例えば、高分子の一軸配向試料から得られた X 線繊維図形データと、コンピューターによる結晶構造モデルのエネルギー最小化計算結果との対比による最適化手法の実例について、実験における注意点を懇切丁寧に紹介しながら、また有用なソフトウェアの紹介も行い、放射光実験の経験の浅い研究者にはことのほか有用な情報が提供された。また、高分子成形体を変形させながら、広角 X 線回折、小角 X 線散乱、赤外分光、ラマン分光などの同時測定により、詳細な構造変化を追跡できることを示し、分子鎖中にたった一つのコンフォメーション変化が導入されることで、一気に結晶配向が変化するを明らかにした事例を紹介した。X 線回折・散乱と赤外・ラマン分光の併用、そしてコンピューターシミュレーションを駆使した高精度な解析により、高分子の構造形成がさらに今後詳細に明らかにされてゆくことが大いに期待される講演であった。