

4. 15:30~16:15

ヌクレオシド、ヌクレオチド結晶における結晶水の動的挙動の解析

菅原 洋子 (北里大学理学部)

DNAにおけるA型-B型構造間での含水量に依存した構造転移はよく知られているが、核酸の構成単位であるヌクレオシド、ヌクレオチド結晶においても、結晶周りの相対湿度に応じて結晶水数が可逆的に増減し、相転移が誘起される。我々は、この現象に注目し解析を進めている。結晶構造解析および分子動力学計算により示された水の揺らぎの幾つかの描像を紹介する。

中性子構造解析を行う事により、X線結晶構造解析では困難な水素原子位置の決定が可能になる。室温において結晶水に顕著な位置の乱れが存在するイノシン 5'-リン酸二ナトリウム結晶についての中性子構造解析の結果を図1に示す。酸素原子の位置の揺らぎの大きい結晶水についても、水素原子位置が明確となり、水素結合をアンカーとした結晶水の揺らぎの描像が得られた。本結果は、蛋白質の中性子構造解析に基づき茶竹らにより提案されている蛋白質の水和水の揺らぎのモデルを支持している。また、結晶水のネットワークとしての揺らぎが観測された。結晶構造解析からは、空間的揺らぎと時間的揺らぎを区別する事は出来ないが、本系においては、 -75°C 近傍でこの揺らぎの凍結に由来する相転移が見出され、動的揺らぎである事が確認された。

一方、グアノシン水和物結晶について分子動力学計算により結晶水の振る舞いの解析を行ったところ、カラム様の空間内での結晶水の移動現象が出現した。これは、結晶水の結晶からの吸脱着経路を示唆している。この他、水和水が生体分子および生体分子集合体の構造に及ぼす効果について、結晶水の増減をトリガーとする相転移の中間状態の構造解析結果に基づき紹介する。

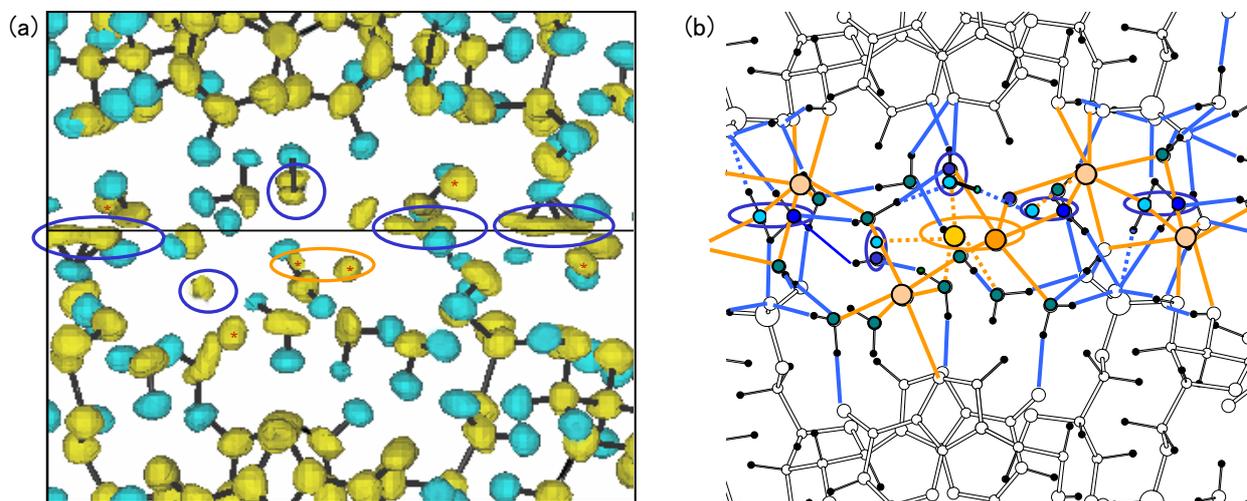


図1 イノシン 5'-リン酸二ナトリウム水和物結晶の結晶構造

(a) 中性子解析により得られた水素原子(水色)と非水素原子(黄色)の核密度分布 (b) (a)図の領域における Na^+ への配位(橙色)と水素結合(青色) 楕円内は位置揺らぎの顕著な水および Na^+

中性子構造解析は東北大学多元研野田幸男氏との共同研究、分子動力学計算は北里大学理学部米田茂隆氏との共同研究として進めたものです。両氏に感謝いたします。