

# 量子ビームで水和水の構造、運動、機能を観る

## Structure, mobility, and function of hydration water studied by quantum beam

菅原洋子・北里大理

生体分子表層には多くの水和水が存在し、柔らかな支えとして生体分子の構造保持に関わると共に、直接、間接に機能に  
関与している。我々は、X線結晶構造解析、ラマン分光法、分子動力学計算などを用いて、核酸の構成単位であるヌクレオチ  
ドの含水量に依存した構造転移の系統的解析を進めてきた。この過程で、水素結合網を明確にするために水素原子位置を  
決定することが必要となり、中性子構造解析を開始したところ、水素原子の核密度分布の決定により、水和水の揺らぎにつ  
いて貴重な情報が多く得られることが明らかになった。一方、生体系の電子伝達を担うタンパク質の一つであるシトクロム *c* につ  
いて、 $\mu$ SR 実験から蛋白質と水和水の協同的運動性が電子伝達に寄与していることを示唆するデータが得られた[1]。蛋白  
質分子内および蛋白質分子間での電子移動は生体機能に重要な役割を果たしている。また、核酸においては、積層した塩基  
間を電子、またはホールが移動することが知られている。この様な核酸や蛋白質の電子伝達において、理論計算より長距離  
の迅速な電子移動に対する水和水の寄与が指摘されている。シトクロム *c* について、含水量を制御した試料の  $\mu$ SR データより、  
湿潤状態では、室温において電子の3次元拡散を示唆する速い緩和が存在し、この効果が200K以下の低温において抑制さ  
れるという知見を得た。200K近傍で起こる蛋白質のガラス転移については、中性子散乱や分子動力学計算などを用いた解  
析から貴重な知見が得られている。今後、水和水の揺らぎと凍結過程を原子分解能でどのように捉えるべきか、機能との相  
関を念頭に置き、構造研究へフィードバックをかけていくことが必要であろう。

[1] Y. Sugawara *et al.*, *JPS Conference Proceedings* (in press).