

 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report 2009.4.15
課題番号 2008G0023 実験課題名 マルチ銅オキシダーゼ酵素 $\Delta \alpha 5-7$ 変異体 CueO のパルス中性子回折実験 実験責任者名 福嶋喜章 所属 株式会社 豊田中央研究所	装置責任者 田中 伊知朗 装置名 iBIX/BL03 実施日 2009/02/14~2009/02/15

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form.
$\Delta \alpha 5-7$ CueO変異体 結晶 0.3 mm ³

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.
<p>$\Delta \alpha 5-7$CueO 変異体結晶サイズが小さく、現状加速器の出力が最終目標の 1/50 (20kW)と弱いため十分な回折強度が得られないことが予想された。飛行時間型中性子回折法の場合、同一面間隔で得られる反射強度は波長の二乗に依存することが知られている。高分解能データがどこまで得られるかを見て、今後どの位のサイズの結晶を育成すれば良いかの目標をたてることを実験目的にした。そのため、中性子波長が長い領域(セカンドフレーム: 4 Å ~ 8 Å)を用い、3台の検出器はそれぞれ高角の、$2\theta = 95.6^\circ$、139.0°、156.6°で配置した。約 30 時間露光を行ったが、空間方向、時間方向ともにスライスし積算を行ったがブラッグ反射を一つも観測することができなかった。</p>

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

事前の $\Delta \alpha 5-7\text{CuO}$ の定常炉における基礎データおよび十分なマシンタイムがあれば、最善な検出器の配置を予測し、十分な統計が蓄積されたブラッグ反射が得られたかもしれない。つまり、以下に述べる、この後の BIX-3 での結果を考えると、検出器角度を低角にして、低次の反射でも良いから Bragg 反射をとることを目標に置けばそれなりの結果は得られた可能性はあった。

iBIX実験直後、全く同一の結晶を用いてJRR-3(定常炉)の単色中性子による実験(BIX-3)を行った。その結果 $d_{\min}=2.8 \text{ \AA}$ の分解能が得られた。0.3mm³の結晶サイズでこの程度の分解能が得られるのは、結晶品質が良いためである。しかし、今のBIX-3、BIX-4の原子炉の強度で、仮に2 \AA (水素が正確に識別できる目安)の分解能を得るためには、得られた反射強度の計算から最低今の結晶の4倍~5倍の結晶サイズが必要になることが分かった。今後加速器の出力が向上し、100kW運転時において、現在の結晶サイズでさえも、1ヶ月程度のマシンタイムは必要になるが、iBIXによりフル反射を得ることが可能である。しかし現在の加速器の出力の予定が大幅に遅れていることから、そのことも考慮し今後も結晶を大きくする努力は続けていく予定である。