

J-PARC茨城県BL 測定事例 解説

アミノ酸（グルタミン酸）

1.概要

グルタミン酸塩は昆布だしの主要うまみ成分であることが約100年前に池田菊苗博士によって発見された。同博士はこれをうま味と呼び、調味料を発明した。この業績は日本の十大発明の一つに数えられ現在も消費量を伸ばしている。

グルタミン酸はアミノ酸の一種であり、結晶の形態をとっている。その結晶の構造・機能・物性を知ることは製品を製造する上で重要である。アミノ酸のような有機低分子結晶においても、従来のX線解析では、結晶水等の水素の精確な解析は困難である場合も多い。中性子解析はこのような分子構造を調べるのに有用な手段である。

2.仕様

グルタミン酸の結晶の一つの結晶形態である α 晶について iBIX を用いて結晶構造解析を行った。

試料名：グルタミン酸- α 相。

試料の大きさ：体積11.5mm³。格子定数：a=7.03Å b=8.78Å c=10.32Å。

セッティング数：20setting、測定時間：4.0h/setting。

3.解説

iBIXでの測定に用いたグルタミン酸 α 晶の写真を図1に示す1)。



図1 iBIXでの測定に用いたグルタミン酸 α 晶1)

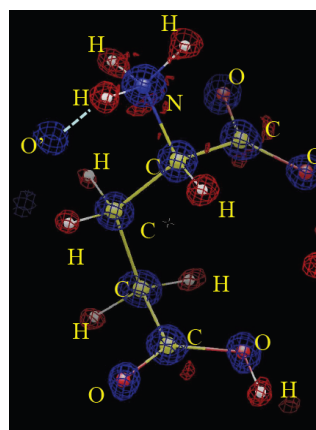


図2 グルタミン酸 α 晶の原子核密度1)

図2では炭素、窒素、酸素の原子核密度を青色の網で、水素の原子核密度を赤色の網で示してある。2つのカルボキシル基COOHを持つが、一方はカルボキシル基COOHで、もう一方はカルボキシレート基COO⁻となっており、水素イオンを隣のアミノ基NH₂に渡してNH₃⁺としている。X線は電子密度の分布を表すのに対して、中性子は原子核の密度を求めることができる。中性子の透過性はX線より大きく、分子内部の原子核の情報を調べることができる。

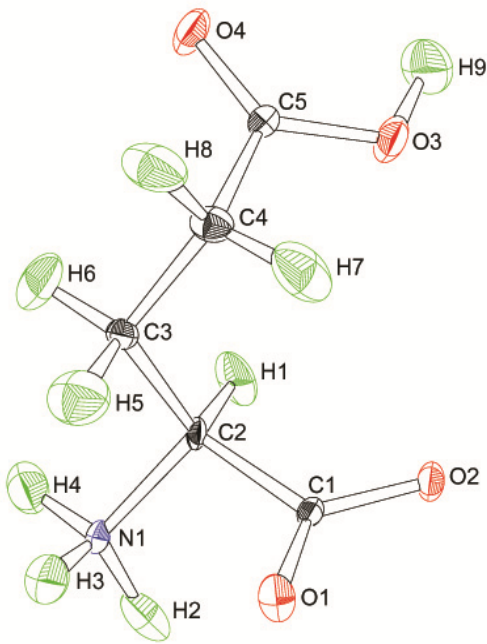


図3 グルタミン酸 α 晶の分子構造2)

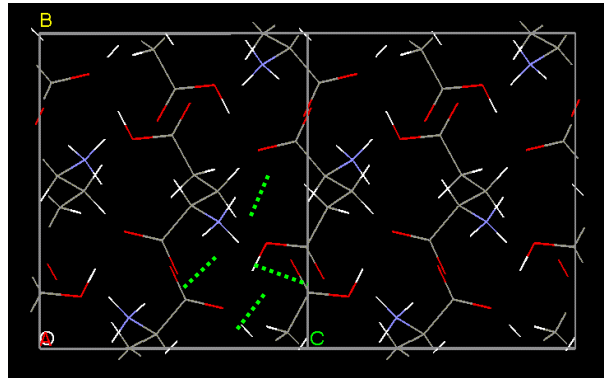


図4 グルタミン酸の結晶構造2)

図3はグルタミン酸 α 晶の分子構造を示す。各原子を表す楕円体は結晶中でその原子の熱振動の大きさを示している。水素原子も異方的に熱振動していることが読み取れる。これは中性子結晶構造解析の大きな特徴である。

図4はグルタミン酸 α 晶の結晶構造を示す。 α 晶中には、アミノ基をドナーとする3種のN-H \cdots Oの水素結合に加え、 δ カルボキシル基と隣接分子の α カルボキシレート基との間にO-H \cdots Oの水素結合が存在する(緑点線)。

測定時のJ-PARCの出力は120kW(計画出力の10分の1)であったにも拘わらず、iBIXを利用した場合には研究用原子炉JRR-3の装置で測定したときの約半分の時間で分解能0.6Å程度の良質のデータを取得することができた。

4. 想定できる産業応用例

- ・有機低分子結晶構造解析によって食品、アミノ酸、医薬品等の幅広い応用が期待されます。事例にあげたグルタミン酸以外のアミノ酸や核酸の結晶(例えば、鰹節のうま味成分であるイノシン酸やしいたけのうま味成分のグアニル酸等)にも適用できることが予想される。
- ・中性子の特徴である水素原子の構造解析によって結晶内のイオン化状態や水和状態の正確な解析が可能となる。
- ・晶析技術高度化の産業応用に活用できる。

5. 参考文献

- 1) 柏木立己(味の素): グルタミン酸結晶の構造解析 茨城県中性子利用促進研究会・生命物質構造解析研究会合同研究会(茨城県) 東京国際フォーラム 2010年10月1日
- 2) 柏木立己(味の素): 中性子産業応用事例集2010 中性子が拓く新たな産業の創出にむけて P14~15 (茨城県企画部科学技術振興課) 2010年3月