

グルタミン酸の中性子構造解析

味の素(株) 鈴木榮一郎

前世紀のはじめ、物理化学者 池田菊苗博士により、出汁昆布から抽出・結晶化されたグルタミン酸試料（写真1参照）は、昨年、国立博物館による「技術未来遺産」に、本年、社団法人日本化学会による「化学遺産」に認定されました。グルタミン酸そのものは酸味を持つため、その塩であるグルタミン酸ナトリウムがうま味調味料（味の素；第五の基本味・うま味の発見と調味料の発明（1908年）、日本オリジナルの十大発明の一つ）として利用されています。また、グルタミン酸は、極めて多くの（特に食用）タンパク質において、最も豊富に含有されている構成アミノ酸であり、1987年に国際機関（FAO/WHO 合同食品専門家委員会）は、「食品添加物としてのグルタミン酸ナトリウムは、人の健康を害することはないので、1日の許容摂取量を特定しない。」との結論を出し、その稀有な安全性は、世界的に確認されるに至りました。2009年の世界の総生産量は、さとうきび等の粗糖を原料とした発酵法により、実に220万トンを超えています。

グルタミン酸の物性は、その発明以来100年以上に亘って様々な角度から研究されています。その結晶成長技術は十分に確立されており、中性子回折実験に適する十分な大きさで高品質な

結晶を得ることが比較的容易です。今回、J-PARCのiBIXを利用して、約2mmの大きさの α 形結晶を測定した結果、0.6Å分解能程度の良質なデータを短時間で取得することができ、結晶構造解析にも成功しました。水素原子は非等方性温度因子で精密化できましたが、このことは、X線構造解析と較べたときの中性子構造解析の大きなメリットです。結晶構造中では、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の水素結合が存在しています（図1参照）。

グルタミン酸は、 α と β の二つの結晶形多形が知られていますので、その水素結合ネットワークの克明な比較には興味深いものがあります。また、中性子回折で得られる精確な水素原子座標に基づく原子間距離と、固体NMRから得られる水素結合周りの水素（プロトン）、炭素（C-13）、酸素（O-17）の化学シフト値との比較考察も極めて興味深いと考えています。中性子回折における原子の散乱長の特徴（水素原子が負、重水素や他の多くの原子が正）を、うまく活用すれば、食品、アミノ酸、医薬品等、多くの事業分野で幅広い分析や構造解析への応用展開が可能であると思われます。



写真1 技術未来遺産・化学遺産
「グルタミン酸試料」

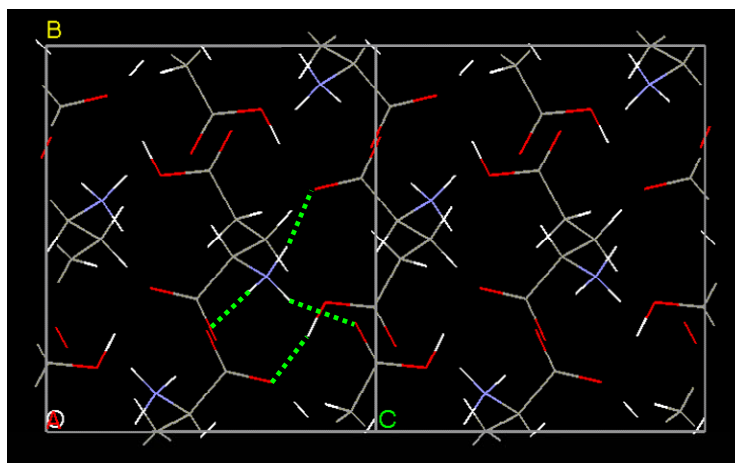


図1 グルタミン酸 α 晶の結晶構造のパッキング図
(緑点線：水素結合)