

## 2013B 期 採択長期利用課題の中間評価について

公益財団法人高輝度光科学研究センター  
利用推進部

第52回 SPring-8利用研究課題審査委員会長期利用分科会（平成27年3月）において、2013B 期に採択された3件の長期利用課題の中間評価が行われました。

長期利用課題の中間評価は、実験開始から1年半が経過した課題の実験責任者が成果報告を行い、長期利用分科会が、対象課題の3年目の実験を実施するかどうかの判断を行うものです。以下に対象課題の評価結果および評価コメントを示します。

－ 課題1 －

課題名	Application Development of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) and Synchrotron Mössbauer Spectroscopy of Multinuclear Iron Proteins
実験責任者(所属)	Stephen Cramer (University of California, Davis)
採択時の課題番号	2013B0103
利用ビームライン	BL09XU
評価結果	3年目を実施する

[評価コメント]

The principal investigator developed the NRVS (Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy) method to study vibrational modes of an iron atom in proteins and has been playing a leading role in introducing it to the biochemical community. His own group are working on Fe-S enzymes, but when this proposal was accepted it was recommended to focus on technical developments and work on individual proteins under separate regular proposals. Following this suggestion, technical developments on online FT-IR diagnostics of a sample and dual-side photon acquisition are in progress. Other interesting experimental ideas and unexpected research results were also presented in the mid-term review. To advance these studies further, the committee

recommends that this group should continue to carry out the experiment in the third year of this long-term proposal.

[成果リスト]  
(査読付き論文)

[1] SPring-8 publication ID = 27050

H. Wang *et al.*: “A Practical Guide for Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy (NRVS) of Biochemical Samples and Model Compounds” *Methods in Molecular Biology* **1122** (2014) 125-137.

[2] SPring-8 publication ID = 27816

L. Lauterbach *et al.*: “Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy Reveals the FeS Cluster Composition and Active Site Vibrational Properties of an O<sub>2</sub>-tolerant NAD<sup>+</sup>-reducing [NiFe] Hydrogenase” *Chemical Science* **6** (2015) 1055-1060.

[3] SPring-8 publication ID = 28326

A. Scott *et al.*: “Structural Characterization of CO-Inhibited Mo-Nitrogenase by Combined Application of Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy, Extended X-ray Absorption Fine Structure, and Density Functional Theory: New Insights into the Effects of CO Binding and the Role of the Interstitial Atom” *Journal of the American Chemical Society* **136** (2014) 15942-15954.

－ 課題2 －

課題名	放射光メスバウア法と X 線粉末回折による下部マントルおよび核構成物質の高温高圧物性の研究
実験責任者(所属)	大谷 栄治 (東北大学)
採択時の課題番号	2013B0104
利用ビームライン	BL10XU
評価結果	3年目を実施する

[評価コメント]

本課題は、地球中心核やマンツルの理解を深めることを目的に、高温高压環境下での X 線回折とメスバウア分光測定を行い、地球構成物質の結晶構造や磁気物性等の物理化学的特性の解明を目指している。具体的には、1) 地球内部に存在する金属軽元素合金、ケイ酸塩や酸化物の高温・高压下での結晶構造、融点、電子状態、磁性の解明、2) 地球内物質の溶融状態の解明の2項目をテーマとして設定している。

その実現のため、高温高压条件下での X 線回折とメスバウア分光の同時測定という世界的にも最先端の技術開発を進め、SPring-8の特性を最大限に引き出すことに意欲的に取り組んでいる。これまでに、この技術を用いて地球および惑星の核構成物質である Fe-Si 合金、FeO、フェロペリクレス (Fe,Mg) SiO<sub>3</sub> の高温高压下の磁性とスピン状態を解明した。また鉄合金や鉄軽元素化合物の高温高压下の状態方程式、融解と相転平衡関係を決定し、さらにケイ酸塩-水素・炭素系の相平衡図も解明し、地球深部を理解する上で意義の高い研究成果を得ている。また、ケイ酸塩-水素・炭素系の相関係の研究では、当初想定していなかった deep diamond の生成を明らかにした。

以上のように、本課題では、X 線回折とメスバウア分光の同時測定の技術開発を推進し、地球構成物質の物性研究も着実に進め、ほぼ計画通りに研究が進展している。特に、地球中心核の温度圧力条件下で、その主要構成物質である鉄合金や鉄化合物の物性解明に果敢に挑戦し、磁気物性という新たな側面から地球内部の理解に取り組んでいる。よって、本課題は最終年度も継続して実施することを推薦する。なお、最終年度に予定している X 線回折とメスバウア分光の同時測定系とレーザー加熱用光学系の組み合わせでは、カーボンミラーの検討も併せて行われることを提案する。

[成果リスト]

(査読付き論文)

- [1] SPring-8 publication ID = 28463  
T. Sakai *et al.*: “Equation of State of Pure Iron and Fe<sub>0.9</sub>Ni<sub>0.1</sub> Alloy up to 3 Mbar” *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **228** (2014) 114-126.
- [2] SPring-8 publication ID = 28466  
S. Ozawa *et al.*: “Jadeite in Chelyabinsk Meteorite

and the Nature of an Impact Event on its Parent Body” *Scientific Reports* **4** (2014) 5033.

- [3] SPring-8 publication ID = 28477  
I. Ohira *et al.*: “Stability of a Hydrous δ-phase, AlOOH-MgSiO<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub>, and a Mechanism for Water Transport into the Base of Lower Mantle” *Earth and Planetary Science Letters* **401** (2014) 12-17.
- [4] SPring-8 publication ID = 28478  
E. Ohtani *et al.*: “Stability of Hydrous Phase H MgSiO<sub>4</sub>H<sub>2</sub> under Lower Mantle Conditions” *Geophysical Research Letters* **41** (2014) 8283-8287.

- 課題3 -

課題名	NRVS of mononuclear and binuclear non-heme iron enzyme intermediates and related model complexes
実験責任者(所属)	Edward Solomon (Stanford University)
採択時の課題番号	2013B0105
利用ビームライン	BL09XU
評価結果	3年目を実施する

[評価コメント]

The group of Professor Solomon are applying the NRVS (Nuclear Resonance Vibrational Spectroscopy) method to intermediates of mononuclear and binuclear non-heme iron-containing proteins. These enzymes are hard to be characterized by resonance Raman spectroscopy because of the lack of strong absorption. The observed spectra are compared with those from DFT (Density Functional Theory) calculation which enables quantitative interpretation of the observed spectra. This group have been publishing papers continuously, and experiments on several proteins and drugs are underway. It is certain that these current studies will lead to publications in major journals. Thus, the committee recommends that this group should continue to carry out the experiment in the third year of this long-term proposal.