実験番号：2015N2005，N3004，N3006 （8 シフト）

BL2S1

加圧による結晶性向上と高エネルギー構造の補足

永江峰幸

名古屋大学シンクロトロン光研究センター

1. 背景と研究目的

蛋白質は加圧に対して，解離・会合やコンフォメーション変化，変性といった様々な応答を示す．こういった圧力に対する応答には蛋白質の水和構造変化が大きく寄与していると考えられている．X 線結晶構造解析法を用いれば，蛋白質分子自身の立体構造に加えて周りの水和構造も決定することが可能である．そこで我々はダイヤモンドアンビルセル（DAC）と放射光の短波長 X 線を使用して，高圧条件下の蛋白質結晶構造解析を推し進めている．

2. 実験内容

ヒトユビキチンのヘキサゴナル結晶を DAC 試料室にサンプリングし，常圧・室温条件のもとで，波長 0.75 Å の短波長の X 線を用い，振動角 1 度，露光時間 20 秒で 40 度分の回折データを収集した．結晶ごとに結晶性や大きさが異なるため，当然回折能も結晶ごとに異なる．この問題を避けるために，常圧条件下と高圧条件下の回折データは同じ結晶の同じ箇所に X 線を照射して収集した．圧力条件については，常圧から最大 670MPa まで，100～200 MPa 刻みで回折データを収集した．

3. 結果および考察

回折データを処理した結果，Rmerge ，I/sigma(I)などの回折データの統計値が加圧によって顕著に改善されることが明らかとなった（Fig. 1）．例えば，Rmerge=30%となる分解能は，常圧データでは 3 Å 程度で 600 MPa データでは 2 Å 程度である．また I/sigma(I)=2 となる分解能は，常圧データでは 2.8 Å 程度で 600 MPa データでは 2 Å を超える．このような統計値の改善は，主にユビキチン周辺の水和構造が加圧によって秩序化されたことによると考えられる．

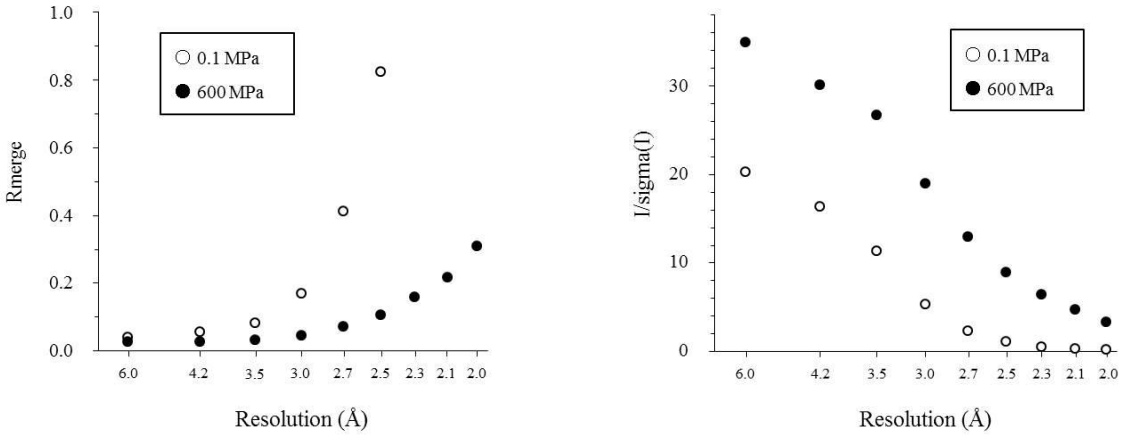

Fig.1 加圧による統計値の改善．常圧下で回折データを収集した後，高圧条件下でも再度結晶の同じ箇所に X 線を照射した．回折データの統計値が顕著に改善されている．