



## 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、高圧力条件下の蛋白質結晶構造解析を推し進めている。これまでにヒトユビキチンのヘキサゴナル結晶に常圧から数百 MPa までの高圧力をかけ、回折データを収集している。データを解析した結果  $I/\sigma(I)$  や  $R_{merge}$  などの統計値が高圧力によって向上することを明らかにした。本実験ではさらに高い圧力をかけユビキチンの圧力応答を見る。

### 2. 実験内容

これまでの実験から、ヒトユビキチンのヘキサゴナル結晶は高圧力下で溶解度が上昇することと、圧力媒体に含まれる沈殿財濃度を上昇させることで溶解を防止可能なことを見出している。そこで本実験では結晶性が悪化しない範囲で可能な限り沈殿財濃度を上昇させた。次に結晶を圧力媒体ごと DAC 試料室に移し、高圧力条件下で回折データを収集し、構造解析を行なった。

### 3. 結果および考察

Fig. 1 に常圧, 600 MPa, 780 MPa 下の結晶構造を示す。プローブサイズ 1.2 Å で空隙をサーチした結果、常圧構造では分子内に空隙が検出されるが、600 MPa 構造では分子収縮によって検出されなくなっている。一方でさらに圧力をかけた 780 MPa 構造では再び分子内に空隙が検出され、すなわち膨張している。またこの空隙には水分子が侵入していることが分かる。一般に高圧力条件下では、部分モル体積を駆動力として、分子内部への水の侵入が誘起されると考えられており、本実験の高圧結晶構造解析によってこれを直接観測することに成功した。

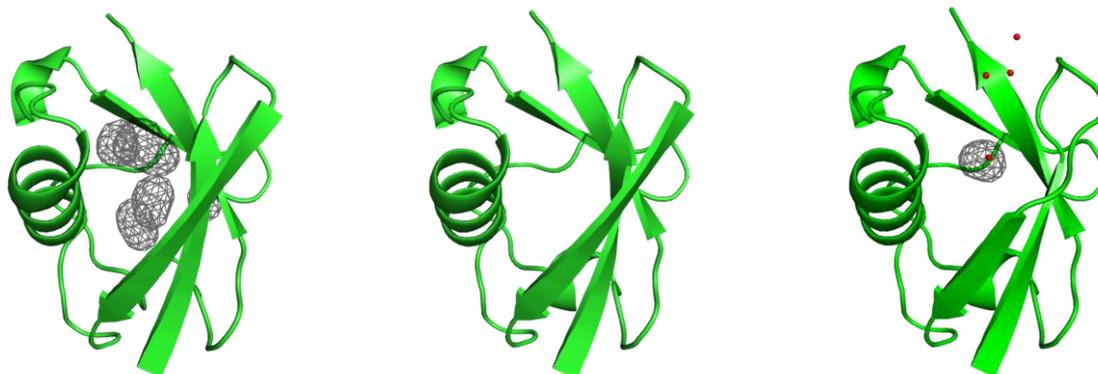


Fig.1 加圧による構造変化. (左) 常圧構造, (中) 600 MPa 構造, (右) 780MPa 構造.  
グレーのメッシュは分子内空隙を, 赤の球は水分子を表す.