

# 小角散乱によるタンパク質水和構造の解析

杉本泰伸<sup>1</sup>、松尾龍人<sup>2</sup>、河野史明<sup>2</sup>、藤原悟<sup>2</sup> 1名古屋大学シンクロトロン光研究センター 2 量子科学技術研究開発機構

キーワード:蛋白質、水和構造、X線小角散乱、ヘモグロビン

## 1. 背景と研究目的

蛋白質は水溶液環境下で機能を発現するため、常に周辺の溶媒水分子と相互作用をしている。蛋白質周辺の水は、蛋白質との相互作用のため、バルク水とは異なった性質を持ち、蛋白質機能発現に大きな役割を果たす。従って、この水和水の物理化学的性質を明らかにすることは、蛋白質の機能発現の分子機構を理解する上で重要である。X線小角散乱と中性子小角散乱を組み合わせた測定により、蛋白質の水和構造情報を得ることができる[1,2]。我々は、蛋白質水和構造情報抽出を目的とした系統的なX線および中性子小角散乱測定を行ってきた。本研究では、その一環として、X線小角散乱測定を行う。

## 2. 実験内容

本研究では、蛋白質試料として hemoglobin (Hb)を用いた X 線小角散乱実験を行った。Hb は 4 個のサブユニットからなる酸素運搬体である。Hb は 4 個の酸素結合部位を持つが、1 つの部位における酸素結合が、他の部位の酸素親和性を増大させる典型的なアロステリック蛋白質である。リガンドが全く結合していない状態とリガンドが 4 個結合した状態に対応した deoxyHb と COHb のそれぞれについて  $H_2O$  中および  $D_2O$  中の蛋白質試料の X 線小角散乱測定を行った。

#### 3. 結果および考察

Figure 1.に、散乱曲線のギニエ解析から得た慣性半径  $R_g$  および I(0)/c (I(0))は散乱強度の原点への外挿値、c は蛋白質濃度)の蛋白質濃度依存性を示す。deoxyHB、COHb のいずれも、 $H_2O$  および  $D_2O$  での結果にほとんど違いはなく、 $D_2O$  の影響はないことが確認された。また、いずれも  $R_g$  の違いはほとんどないことが明らかとなった。一方、広角領域までの測定で、deoxyHB と COHb の散乱曲線に違いがあることが示された(Figure 2.)。これらのデータを別途測定予定の中性子小角散乱データと組み合わせて解析することで、水和構造情報が抽出できることが期待される。

#### 4. 参考文献

- 1. D.I. Svergun, et al., *Proc. Natl. Acad.Sci. USA* **95** (1998) 2267-2272.
- 2. T. Matsuo, T. Arata, T. Oda, and S. Fujiwara, BIOPHYSICS 9 (2013) 99-106.

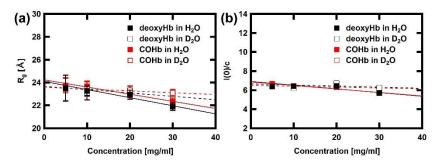


Figure 1. (a) Rg および(b) I(0)/c の蛋白質濃度依存性

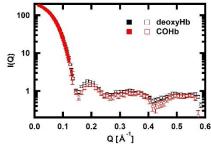


Figure 2. deoxyHb および COHb の散乱曲線