



アクチンと結合タンパク質の X 線結晶構造の解明

武田 修一
名古屋大学

キーワード：アクチン，アクチン結合タンパク質，X 線結晶構造解析，ATP 加水分解

1. 背景と研究目的

細胞骨格タンパク質アクチンはほとんどの真核細胞中で最も多量に発現しており、様々な生態現象に関与する。単量体アクチン（G アクチン）は、集合し繊維状の F アクチンを形成することで機能し、様々なアクチン結合タンパク質がその重合状態を制御する。我々はこれまでに BL2S1 における測定により、真正粘菌のゲルゾリンホモログであるフラグミンとの複合体として繊維状コンフォメーションのアクチンの X 線結晶構造を報告している（文献 1）。フラグミンと似た主鎖折りたたみ構造を持つタンパク質は数多く存在する。今回はその内の一つであるコフィリンに注目し、古細菌に存在するホモログの構造解析を行った。

2. 実験内容

古細菌コフィリンは大腸菌発現系を用いて精製した。市販のスクリーニングキットを用いて、シッティングドロップ蒸気拡散法で結晶化条件のスクリーニングを行った。得られた結晶について、BL2S1 で回折実験（波長 1.12 Å）を行った。回折データは XDS で処理した。

3. 結果および考察

いくつかの結晶について回折実験を行ったところ、最高分解能 1.5 Å のデータセットが得られた。XDS による処理結果を以下に示す。AlphaFold3 によって得られたモデル構造を用いて、分子置換法で初期位相が得られた。空間群は $P2_1$ で、単位胞あたり 2 分子の古細菌コフィリンを含んでいた。今後、構造最適化を行う。

SUBSET OF INTENSITY DATA WITH SIGNAL/NOISE >= -3.0 AS FUNCTION OF RESOLUTION													
RESOLUTION LIMIT	NUMBER OF REFLECTIONS			COMPLETENESS OF DATA	R-FACTOR observed	R-FACTOR COMPARED expected	I/SIGMA	R-meas	CC(1/2)	Anomal Corr	SigAno	Nano	
4.48	9519	1664	1746	95.3%	2.6%	2.6%	9506	59.05	2.8%	99.9*	-18	0.733	1286
3.17	19291	2940	3015	97.5%	3.0%	2.9%	19288	54.10	3.3%	99.9*	-19	0.740	2576
2.59	26916	3761	3863	97.4%	4.8%	4.6%	26912	36.67	5.2%	99.9*	-12	0.747	3412
2.25	28204	4386	4542	96.6%	7.2%	7.1%	28195	24.22	7.8%	99.6*	-9	0.743	3964
2.01	23481	4221	5110	82.6%	10.9%	11.4%	23453	14.93	12.1%	99.1*	-5	0.741	3762
1.84	24898	5049	5682	88.9%	21.2%	23.3%	24869	7.28	23.9%	96.7*	-5	0.678	4448
1.70	24931	5517	6068	90.9%	40.5%	45.5%	24904	3.74	46.2%	88.0*	-2	0.660	4951
1.59	23315	5944	6574	90.4%	72.2%	82.0%	23276	1.93	83.7%	65.4*	-2	0.637	5286
1.50	20588	5496	6989	78.6%	124.6%	145.7%	20496	1.05	145.2%	41.6*	-4	0.592	4755
total	201143	38978	43589	89.4%	6.2%	6.4%	200899	16.40	6.9%	99.9*	-6	0.685	34440

4. 参考文献

1. Kanematsu, et al., *PNAS*, 2022