

ヘムタンパク質のリガンド解離過程における構造ダイナミクス実時間観測

Real-time observation of the structural dynamics of ligand-dissociation processes in heme-proteins

富田文菜¹、佐藤篤志²、野澤俊介¹、柴山修哉³、Kyung Hwan Kim⁴、Hyotcherl Ihee⁴、足立伸一¹

1 KEK-物構研、2 DESY-CFEL、3 自治医大-医、4 KAIST-Dept.Chem

生体中で働く機能性分子について、分子構造変化の詳細をリアルタイムで観測することは未だ容易ではないが、もしそれが観測できるようになれば、構造変形を伴う機能性分子が生体内でどのような機構で役割を遂げているのかを明らかにすることができると期待される。本講演では、一酸化炭素(CO)をリガンドとして結合させた貝類(*Scapharca inaequivalvis*)の2量体ヘモグロビン(HbI)について、ポンプ-プローブX線溶液散乱法によって明らかになった構造ダイナミクスの詳細[1,2]と、その測定手法について紹介する。HbIのCOの解離・再結合過程では独立な3つの中間状態を経て、サブユニット間に存在する水分子の出入りが観測され、リガンドの解離に伴う水和構造の変化が観測された。この実験は、PF-ARの通年シングルバンチ運転を利用し、放射光のパルス性を生かした、時間分解実験専用ビームラインNW14A[3]にて、測定が行われたが、同様の系についてX線自由電子レーザー(SACLA)でのフェムト秒パルスX線を用いたダイナミクス観測にも成功している。

また、単結晶構造解析によって生体分子の構造ダイナミクス観測を試みる系についても紹介する予定である。HbI同様、CO結合型のヘムタンパク質、ミオグロビンや4量体ヘモグロビンについても、光照射によってCOの解離を起こさせることが可能であるため[4,5]、原理的にはポンプ-プローブX線結晶構造解析法を適用する事が可能である。

- [1] Kyung Hwan Kim *et al.*, *JACS* **134** (2012) 7001-7008.
- [2] 富田文菜他、*結晶学会誌* **56** (2014) 253-258.
- [3] Shunsuke Nozwa *et al.*, *JSR* **14** (2007) 313-319.
- [4] Ayana Tomita *et al.*, *PNAS* **106** (2009) 2612-2616.
- [5] Friedrich Schotte, *et al.*, *Science* **300** (2003) 1944-1947.