

D-キシロースイソメラーゼ結晶の水和構造の解析

Neutron Diffraction Analysis of Hydration
in D-Xylose Isomerase

菅原 洋子¹⁾ 大滝 正訓¹⁾ 山村 滋典¹⁾ 田中 伊知朗²⁾ 新村 信雄³⁾
Yoko SUGAWARA Masanori OOTAKI Shigefumi YAMAMURA Ichiro TANAKA Nobuo NIIMURA
大原 高志⁴⁾
Takashi OHHARA

¹⁾北里大理 ²⁾茨城大工 ³⁾茨城大院理工 ⁴⁾原子力機構

斜方晶 D-キシロースイソメラーゼは、含水量の約2割の減少により、体心格子 ($I222$) から単純格子 ($P2_12_12$) へ転移する。この現象について中性子構造解析により水和構造の変化を明らかにする事を目的とし、回折強度測定を行ったが、含水量の減少に伴う著しい結晶性の劣化がおこり、強度データを得られなかった。

キーワード : D-キシロースイソメラーゼ、水和構造、相転移

1. 目的

D-キシロースイソメラーゼは、D-キシロースとD-キシルロースの変換反応などを触媒する酵素で、中性子結晶構造解析が報告されている¹⁾。申請者らはこの結晶について含水量の約2割の減少が体心格子 ($I222$) から単純格子 ($P2_12_12$) への変換を引き起こすことを見出した。そこで、本課題では中性子結晶構造解析により水和構造を明らかにし、蛋白質間相互作用における水と水の役割を解明することを目指した。

2. 方法

D-キシロースイソメラーゼの単結晶は、相対湿度84%条件下に置くと含水量が2割程度減少し転移が起きることが分かっている。そこで、単結晶を KBr 飽和溶液(密閉系内を相対湿度84%に制御)、とともに石英キャピラリーに封じて、波長 2.9 Å の中性子を用い BIX-3 により回折強度測定を行った。また、 $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 飽和溶液(密閉系内を相対湿度81%に制御)を用いた同様の実験も行った。

3. 研究成果

複数の結晶について回折強度測定を行ったが、いずれも結晶の乾燥処理に伴い結晶性が劣化し、回折強度を得られなかった。

4. 結論・考察

X線回折強度測定においては、1mm 角程度の大きさの単結晶を用いて、上記の方法で乾燥を行っているが、モザイク性の増大は生じるものの、回折強度データは得られている。中性子では、2mm 角程度の大きさの結晶を用いているため、均一に結晶水を抜く事が難しく、著しい単結晶性の劣化が生じたとみられる。結晶の大きさにあわせた脱水処理方法の検討が必要であることが明らかになった。

5. 引用(参照)文献等

1) Katz et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **103** (2006) 8342.