斜方晶リゾチームにおける結晶モルフォロジーと分子間接触エネルギー関連の半定量的評価

(阪大蛋白研・東北大金研・ロシア結晶研/NASA) ○松浦良樹、沖英幸、小松啓、
A. A. Chernov

結晶成長の特徴を支配する要因のひとつに、結晶を形づくる分子または原子間の強い相互作用を挙げることができる。古くからこの問題はBennemaらによりPBC (periodic-bond-chain) 理論として展開されてきた。また最近蛋白質結晶への応用も試みられている。我々は斜方晶リゾチームについて、その結晶構造を精密化 (1.7Å分解能) し、分子間接触の実体をより化学的相互作用の面から捉え解析することを試みた¹⁾。斜方晶リゾチーム結晶 (P2₁2₁2₁, a=56.44, b=73.73, c=30.43Å) 中には1分子あたり6個の分子間接触部位があり、そのうち2つずつは化学的に等価であることから、3個の独立な分子間接触モードが存在する。我々はこれらをマクロボンドA, B, Cと名付けた。これらのボンドに含まれる分子間水素結合はそれぞれ6, 5, 2個であり、Aではひとつの塩素イオンとArgのNηの相互作用も含まれている。3種のマクロボンドを通じて特徴的なことは、すべての接触にArg残基の関与が見られることである。これは卵白リゾチームに含まれる11個という蛋白質分子一般の平均より3倍も多いArg含量が関係していると思われる。また、この残基のflexibilityと側鎖先端の強い陽イオン性が、卵白リゾチームが4つの晶系に容易に結晶化する性向と関連していると推測することができる。各マクロボンドを構成する分子間原子相互作用対を分類して表1にまとめた。マクロボンドエネルギーは強い水素結合と思われる対について3 kcal/mol、水介在のものに1.5 kcal/mol、他の4Å以内の原子間対について0.3 kcal/molの値を仮定して計算した。一方、マクロボンドを分子中心と接触部位代表点を結ぶ線分として表現し、結晶構造を描画することにより、各結晶面をよぎるマクロボンドの数を算出し、エネルギー見積値 (表1) を用いて、各結晶面について法線方向の結合エネルギー (V_{across}) と

$V_{\text{total}} = 4A + 4B + 4C = V_{\text{across}} + V_{\text{within}}$
の関係から結晶面内の結合エネルギー

(V_{within}) を評価し、結晶モルフォロジー

(昨年度結晶学会にて報告) との関連を考察した。この結果ほぼ良好な相関が見いだされたが、必ずしも良い相関を示すとは言えない関係もあり、結晶成長を支配する因子の多様性が示唆された。

表1. マクロボンド中の分子間原子相互作用

	A	B	C
Total	108	69	50
Direct H-bond	6	5	2
Water H-bond	18	10	9
Other interact.	84	54	39
Macrobond energ.	70.2	46.2	31.2
	(kcal/mol)		

1) Oki, Matsuura, Komatsu, Chernov (1998), *Acta Cryst. D*, in the press.