

(様式 1-1)

提出日：2025 年 5 月 13 日

2024 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

## 研究成果報告書

(1) 事業名 (下記より該当事業名を選択し、ほかは削除してください。)

共同研究員 ・ 超高磁場 NMR

(2) 研究代表者

氏名：三島 正規

所属機関名・部局名・職名：東京薬科大学・薬学部・教授

(3) 研究課題名 (申請時に記載したものと同一課題名を記入してください。)

リシン側鎖がアクセプターとなる水素結合の NMR 解析

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名：宮ノ入 洋平 准教授

(研究室名：先端計測研究室 )

(5) 研究成果の概要

シアノバクテリアの光センサータンパク質である RcaE の GAF ドメインには、発色団としてフィコシアノピリンが結合しており、異なる波長の光吸収に応じて RcaE は、緑色光吸収型 (Pg 型) と赤色光吸収型 (Pr 型) の 2 つの別々の構造をとる。我々は蛋白研で行った Pg 型の NMR 測定の結果から、脱プロトン化して NH<sub>2</sub> となった Lys261 の側鎖は、その不対電子が水素結合のアクセプターとなり、発色団 PCB の D 環の NH の水素がドナーとなるような、新奇な水素結合を形成していることを明らかにした (タンパク質における、世界初の塩基性アミノ酸の側鎖が「アクセプター」となる水素結合の同定である)。測定では HNN-COSY を LysNH<sub>2</sub>-HN 水素結合に適用できるように最適化を行い、LysNH<sub>2</sub>-HN 水素結合の形成によって生じるスピン結合による NMR 信号を観測した。交差ピークの強度からスピン結合定数  $^2J_{\text{NN}}$  は、3 Hz 程度、強度変調実験からは 2.5 Hz 程度と、その大きさを決定した (*Proc Natl Acad Sci U S A.* 2024 121 (36) e2404472121)。LysNH<sub>2</sub>-HN 水素結合の同定は、タンパク質におけるリシン側鎖の役割りの再考を促すという点からも極めて重要な知見といえる。