

ランタノイドタグを用いた NMR と ESR によるタンパク質のコンフォメーション解析

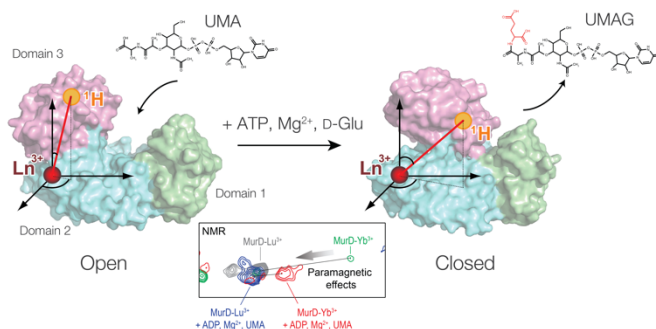
(徳島大先端酵素¹⁾ ○齋尾 智英¹

Protein conformational changes investigated by NMR and ESR using paramagnetic lanthanide tags (¹*Institute of Advanced Medical Sciences, Tokushima University*) ○Tomohide Saio¹

Despite the dynamic features of proteins in solution, the structural variations and changes of proteins in solution are poorly understood mainly because of the scarcity of the effective methods in solution structural study. Here in this study, paramagnetic lanthanide ions were exploited in NMR and ESR to investigate conformational variations and changes of a multidomain protein enzyme MurD. Paramagnetic lanthanide ions were immobilized on specific sites in MurD by a lanthanide-binding tag. In NMR, long-range structural information extracted from the paramagnetic effects highlighted ligand-driven conformational change of the protein. In ESR, the distance distribution between the lanthanide ions attached on the two different sites in MurD showed conformational variation of MurD.

Keywords : Protein conformational change; multi-domain protein; paramagnetic lanthanide ion; NMR; ESR

溶液中のタンパク質は動的であり、リガンド結合や翻訳後修飾などによって立体構造を変化させながら機能している。そのため、タンパク質の動的な姿を理解することは、そのタンパク質のメカニズムの理解に重要であるが、一方で、有効な手法の欠如のために、多くのタンパク質について動的な特性は十分に理解されていない。本研究では、常磁性ランタノイドイオンを用いた NMR と ESR によって、マルチドメインタンパク質 MurD の構造解析に取り組んだ。NMR 実験では、常磁性効果に基づいて、リガンド結合に伴う MurD のコンフォメーション変化を解析した¹⁾。ESR 実験では、2箇所に導入した常磁性ランタノイドイオン間の距離分布を計測することにより、マルチドメインタンパク質のコンフォメーション分布を解析した²⁾。



1) Ligand-driven conformational changes of MurD visualized by paramagnetic NMR. Saio T, Ogura K, Kumeta H, Kobashigawa Y, Shimizu K, Yokochi M, Kodama K, Yamaguchi H, Tsujishita H, Inagaki F. *Sci Rep.* **2015**, 5, 16685.

2) Conformational ensemble of a multidomain protein explored by Gd³⁺ electron paramagnetic resonance. Saio T, Hiramatsu S, Asada M, Nakagawa H, Shimizu K, Kumeta H, Nakamura T, Ishimori K. *Biophys. J.* **2021**, 120, 2943-2951.