



## PET 分解酵素の結晶構造解析

坂井 みずき<sup>1,2</sup>, 平野 優<sup>2,1</sup>, 玉田 太郎<sup>2,1</sup>  
1 千葉大学, 2 量子科学技術研究開発機構

キーワード：ポリエチレンテレフタレート, 中性子, 室温測定

### 1. 背景と研究目的

ポリエチレンテレフタレート（PET）は年間数千トンも生産されているのに対し、リサイクルされているのは数%に過ぎない。また、マイクロプラスチックによる環境汚染は大きな社会問題となっている。そこで、PET を効率的に分解するシステムが環境・エネルギー面の双方から求められている。我々は PET を効率的に分解する微生物が持つ酵素（*Ideonella sakaiensis* 由来 PETase）<sup>[1]</sup> に着目し、中性子および X 線結晶構造解析によりその触媒機構を水素原子を含めて原子レベルで理解することを目的として研究を実施している。

### 2. 実験内容

中性子を用いた室温測定に向けて、室温および低温で X 線結晶構造解析を行い、晶系・測定条件間における回折データ・立体構造の相違を評価した。既知の 2 つの晶系（ $P2_12_12_1$ 、 $C222_1$ ）の結晶を取得し、前者は低温（100K）3 データ、室温 2 データ、後者は室温 1 データ収集した。 $P2_12_12_1$  結晶の低温測定については、検出器をオフセット設定したデータ収集も併せて実施した。取得した回折データは XDS で処理し、Refmac と Coot を用いてモデルの構築と精密化を実施した。

### 3. 結果および考察

$P2_12_12_1$  結晶は、低温（オフセット設定）で 1.3Å、室温で 1.6 Å、 $C222_1$  結晶は室温で 2.0Å で構造決定した。室温測定については、測定開始時と終了時（計 540 秒露光）の回折イメージと統計値（ $R_{merge}$ ）を比較したが、目立った照射損傷は確認されなかった。 $P2_12_12_1$  結晶の低温・室温測定間の比較については、凍結により格子定数（ $b, c$  軸）が 1~2%縮んだが、主鎖構造に大きな違いは見られなかった（全 Ca 原子で計算した RMSD 値は 0.28Å）。側鎖についても同様のコンフォメーションが観察され、測定温度による立体構造への影響はほとんどないことが確認できた（Fig.1）。今回の実験結果から、今後中性子回折データ収集の指針を立てることが出来た。

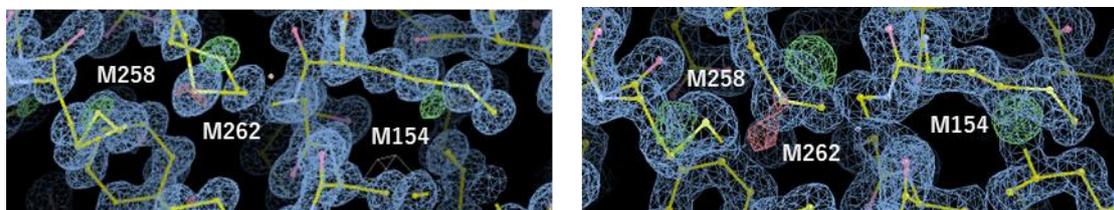


Fig.1 側鎖コンフォメーションの比較（左：低温、右：室温）

### 4. 参考文献

1. Yoshida S, et al., *Science* **351**, 1196-1199 (2016).