

β-ヘリックス人工分子針の動的集合設計

(東工大生命理工¹・九大理²・名大理²) ○菊池 幸祐¹・福山 達也²・Maity Basudev¹・古田 忠臣¹・前多 裕介²・内橋 貴之³・上野 隆史¹

Design of the dynamic assembly behaviors of artificial β-helical protein needles (¹*School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology*, ²*Department of Physics, Kyusyu University*, ³*Department of Physics, Nagoya University*) ○ Kosuke Kikuchi,¹ Tatsuya Fukuyama,² Basudev Maity,¹ Tadaomi Furuta,¹ Yusuke T. Maeda,² Takayuki Uchihashi,³ Takafumi Ueno¹

Recent progress on structural analysis and computational methods has allowed the accurate design of protein assemblies. However, the dynamic behavior of molecules in their assembly process remains unclear. In this study, we investigated the assembly mechanism of artificial β-helical protein needles (PN) derived from bacteriophage T4. We regulated the two-dimensional assembly behaviors of PN by engineering the tip domain and observed the dynamic behaviors directly by high-speed atomic force microscopy (HS-AFM).

Keywords : Protein Assembly; β-helix; High-speed Atomic Force Microscopy; Single-molecule Analysis; Monte Carlo Simulation

タンパク質は自発的な集合によって複雑な構造体を形成可能であり、なかでもその二次元集合体は機能性材料として注目されてきた。近年では構造解析や計算科学手法の発達によりタンパク質集合体の精密設計が可能となってきたものの、分子の動的特性にもとづいた集合体設計指針

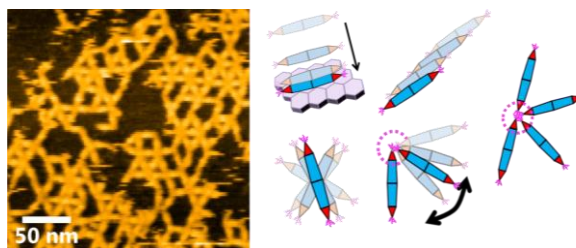


Figure 1. マイカ基板上 PN 二次元パターン形成および集合体構築を誘起する PN 単分子の動的挙動。

は確立されていない。それは、会合状態から規則構造形成に至る過程の直接観察が困難であり、分子集合化の動的メカニズムの理解が進んでいないためである。タンパク質の会合体が秩序パターン構造へと変換される際の分子の協同的な運動を追跡することができれば、集団的挙動に基づいた集合体設計が可能になると期待できる。そこで本研究では、バクテリオファージ T4 由来の β-ヘリックス人工分子針 (Protein Needle, PN) に着目した¹。高速原子間力顕微鏡 (HS-AFM) による PN の動的挙動の単分子レベル追跡²にもとづき、その動的挙動制御による二次元集合体形成を試みた。HS-AFM 観察の結果からマイカ基板上において PN は動的な正三角形モザイクパターンを形成することが示され、モンテカルロシミュレーションによって PN の単分子での運動性が秩序だった集合構造形成に必要なことが明らかとなった (Figure 1)。

- 1) Yokoi, N.; Inaba, H.; Terauchi, M.; Stieg, A. Z.; Sanghamitra, N. J. M.; Koshiyama, T.; Yutani, K.; Kanamaru, S.; Arisaka, F.; Hikage, T.; et al. *Small* **2010**, *6*, 1873–1879.
- 2) Ueno, T.; Niwase, K.; Tsubokawa, D.; Kikuchi, K.; Takai, N.; Furuta, T.; Kawano, R.; Uchihashi, T. *Nanoscale* **2020**, *12*, 8166–8173.