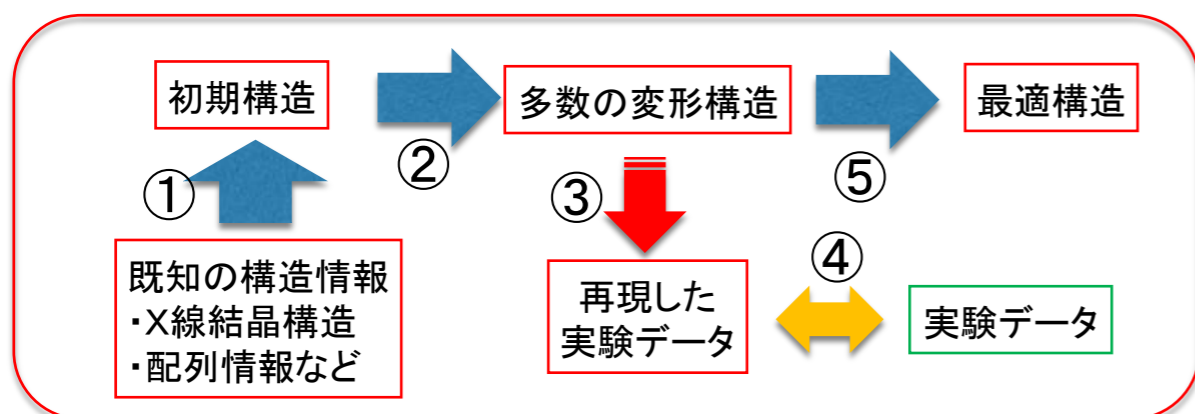


# 低解像度立体構造情報を再現する原子モデル構造構築技術

## [技術の概要]

### 原子モデル構造構築の手順

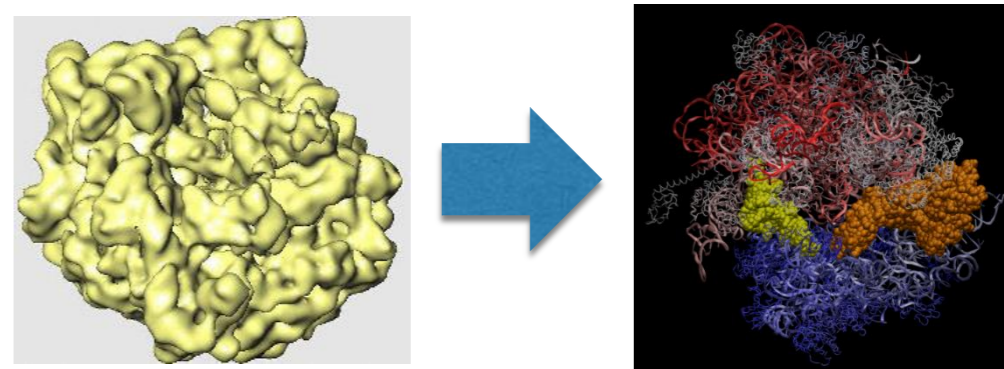


- ① 既知の構造情報をもとに、初期構造を構築します。
- ② 計算機手法を用いて、初期構造を変形し、多数の変形構造を構築します。
- ③ 各変形構造から実験データをシミュレートします。
- ④ 実験データとシミュレーション結果を比較します。
- ⑤ 実験データと最も類似度の高い変形構造を選びます。

### 支援に供する設備等

- ・計算機クラスター
- ・開発した計算機プログラム
- ・必要に応じてプログラム開発を行います。

## [技術の利用例]



3D-EM構造(左)をもとに、蛋白質合成途中の70Sリボソームの原子モデル構造(右)を構築しました。3D-EM構造に含まれる70Sリボソーム、tRNAおよびEF-GそれぞれのX線結晶構造を変形し、3D-EM構造が再現されるように全体構造を構築しました。

### 連絡先

[所属] 日本原子力研究開発機構

[名前] 松本 淳

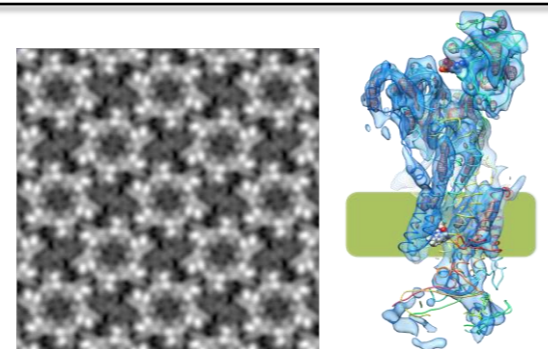
[E-mail] matsumoto.atsushi@jaea.go.jp

# 多様な顕微鏡技術による膜タンパク質複合体の多階層での機能構造研究

## [技術の概要]

### 電子線結晶学

- 二次元結晶及び氷包埋サンプル作製の技術支援
- 電子線結晶学による構造解析支援

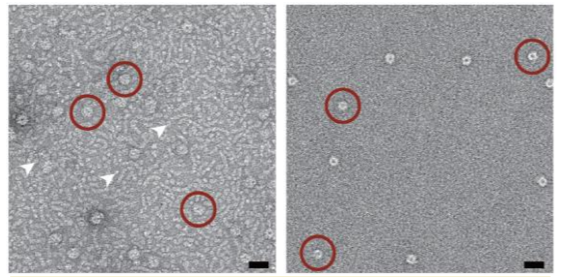
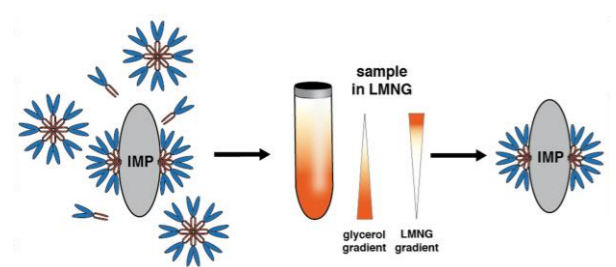


Gap Junction Channelの二次元投影像(左)とH<sup>+</sup>、K<sup>+</sup>-ATPaseの立体構造(右)

### 単粒子解析

- 膜タンパク質単粒子解析の為の界面活性剤除去法による技術支援

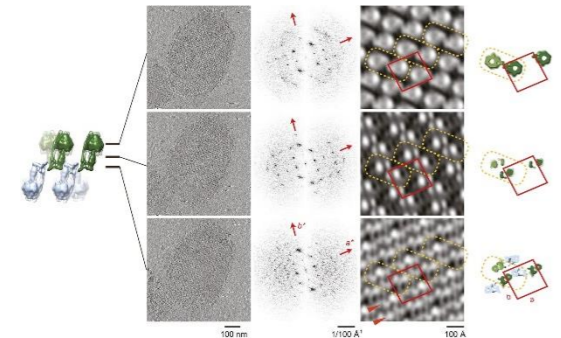
**GraDeR: Gradient-based Detergent Removal for single particle cryo-EM**



Gap Junction Channel (○) の負染色像。GraDeR処理前(左) 処理後(右)においてミセル(矢尻)が除去できていることが分かる。

### 電子線トモグラフィー

- TomeX: トモグラフィーを利用した電子線結晶構造解析による支援



ウシ心筋ATP合成酵素の脂質膜再構成ベシクルのトモグラフから、厚さ方向を含めた興味領域を切り出し、電子線結晶学により解析することで、定法では解析できない小さな二次元結晶であっても構造解析が可能になる。

## [技術の利用例]

### 電子線結晶学

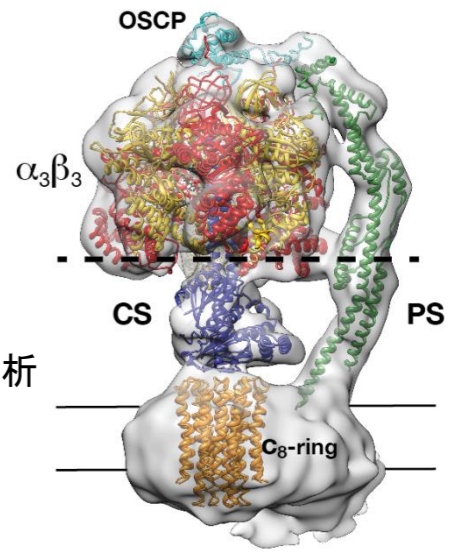
- H<sup>+</sup>、K<sup>+</sup>-ATPaseの構造解析 (Abe et al., 2012, PNAS 他)
- Gap Junction Channelの構造解析 (Oshima et al., 2007, PNAS 他)
- カーボンサンドウィッチ法による二次元結晶の分解能向上 (Yan and Abe et al., 2013, Microscopy)

### 単粒子解析

- ウシ心筋F-ATPaseの立体構造解析
- GraDeR法の確立 (Hauer and Gerle et al., 2015, Structure)

### 電子線トモグラフィー

- TomeXによる脂質再構成F-ATPaseの構造解析 (Jiko et al. and Gerle, 2015, eLife)



## 連絡先

- [所属] 1. 兵庫県立大学  
2. 名古屋大学

[名前] Christoph Gerle<sup>1</sup>、大嶋篤典<sup>2</sup>、阿部一啓<sup>2</sup>

[E-mail] gerle.christoph@gmail.com  
atsu@cespi.nagoya-u.ac.jp  
kabe@cespi.nagoya-u.ac.jp

# 分子複合体全体構造への電顕イメージング法の活用 ～電子直接検出器を用いた高分解能解析等～

## [技術の概要]

### 支援メニュー

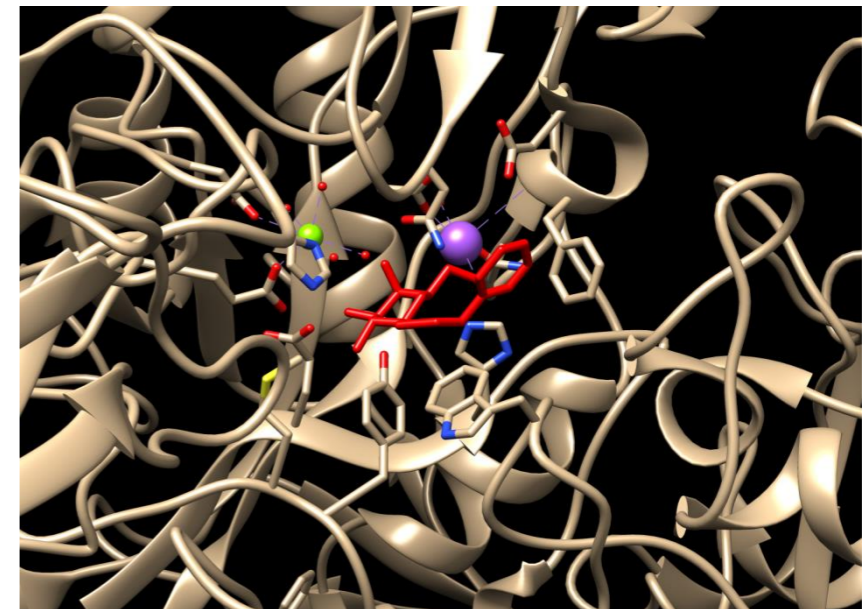
- 分子量10万Da以上のタンパク質および薬剤等とのタンパク質複合体の3D電子顕微鏡解析
- フレキシブルなタンパク質や、抗体等との複合体分子の2D電子顕微鏡解析

### 支援に供する設備等

- 電子直接検出カメラを備えた超高性能クライオ電子顕微鏡(実際の操作はオペレーターが行います)
- 凍結装置、クライオミクローム等の試料作製装置
- 電顕画像解析計算機

## [技術の利用例]

### 標的タンパク質と薬剤複合体の 電顕近原子分解能解析



### 連絡先

[所属] 大阪大学蛋白質研究所

[名前] 岩崎憲治

[E-mail] [ikenji@protein.osaka-u.ac.jp](mailto:ikenji@protein.osaka-u.ac.jp)



# 2Dハイブリッド解析

## [技術の概要]

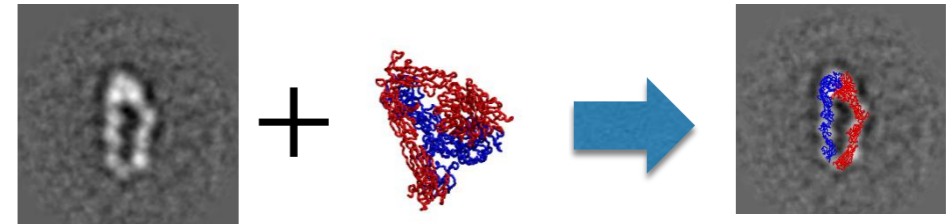
### 支援メニュー

- 提供された生体分子の2D電子顕微鏡画像の取得、およびそれを再現するような立体構造モデルの構築
- それに付随したコンフォメーション変化等の構造情報

### 支援に供する設備等

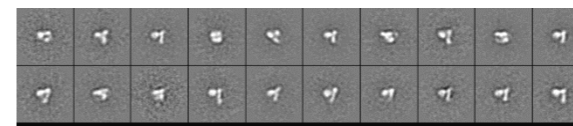
- 大阪大学蛋白質研究所の電子顕微鏡施設
- 日本原子力研究開発機構関西光科学研究所の計算機クラスター
- 開発した計算機プログラム
- 必要に応じてプログラム開発も行います。

## [技術の利用例]

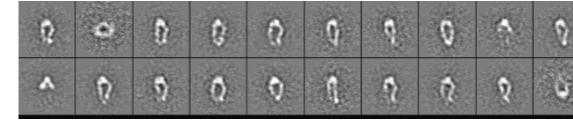


結晶構造を変形して電顕画像を再現するモデルを構築します。

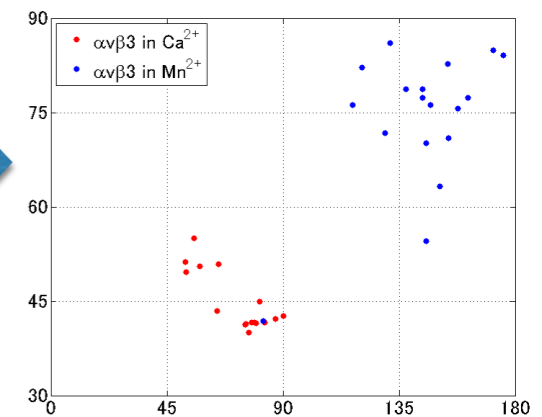
Ca<sup>2+</sup>溶液中の構造



Mn<sup>2+</sup>溶液中の構造



多数の電顕画像から構造分布情報を得ることができます。



### 連絡先

[所属] 日本原子力研究開発機構

[名前] 松本 淳

[E-mail] matsumoto.atsushi@jaea.go.jp