

# ウイルスキャプシド模型

多くの球状ウイルスは正20面体対称性を持ち、サブユニットの数と配置はT数 (T-number) の値によって決定され、T 数はCaspar とKlug の“準等価性 (quasi-equivalence)” 理論から導かれます。

## 準等価性理論

正20面体を構成する20の面を形作る三角形の各面に3個ずつサブユニットを配置していくと、60個のサブユニットを等価な位置に配置することができます (図1 (a))。この構造体は12個のペントマー (5量体) からなると見ることができます。このように60個のサブユニットから成るウイルスも存在しますが、実際は、サブユニット数は60よりずっと多いことが多く、その場合にはすべてのサブユニットを等価な位置におくことはできなくなります。この問題に対して、1962年にCaspar とKlug は“準等価性 (quasi-equivalence)” の概念を提出しました。

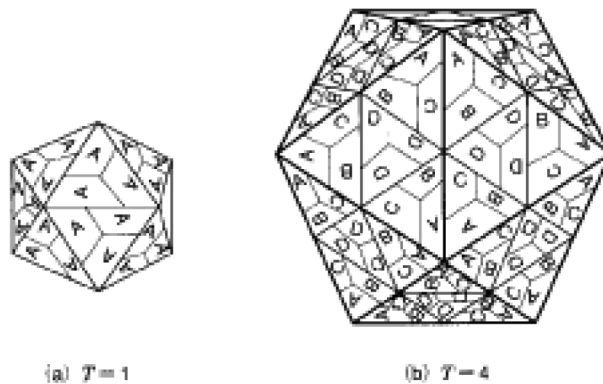


図1. 球殻構造と準等価性理論

A, B, C, D はいずれも同一のサブユニット蛋白質分子で、それぞれ異なる環境にあることを示している。T=1 ではすべてのサブユニットを等価な位置に置くことができるが、T>1 では等価な位置にすべてのサブユニットを置くことはできない。

この理論では、正20面体のウイルスキャプシド (頭殻) はペントマーとヘキサマー (6量体) の2種類の構造から成ると仮定します。ヘキサマーが基本的には平面状の構造であるのに対し、ペントマーは頂点が出張った形になります。その場合、同じ蛋白質分子が5量体と6量体の2種類の構造を作り、環境も異なる (図1 (b)) ので1)、両者におけるサブユニット (モノマー) の構造および結合関係は完全に同じではなく、サブユニットは同じ結合関係を保ったまま、多少の歪みを許して“準等価”な関係を保つと考えられます。この理論は“準等価性理論”と呼ばれます。

# T数とは

ペンタマーは正20面体の各頂点に位置するので常に12個存在しますが、ヘキサマーはウイルスの大きさによって数が異なります。今、図2のような多数の正三角形から成るネットを考え、任意の格子点を原点として、60度の角度をなす2つの軸、h軸とk軸をとります。ここで、原点から60度の角度をなす任意の領域(例えば、図の斜線の部分)を切り落とし、切り取られた辺をつなげて原点のヘキサマーをペンタマーにすることができます。こうしてできた5回対称の原点を仮定して、次のペンタマーをどこに配置するかによって正20面体の大きさが一義的に決まります。例えば、この座標系の各点の座標を(h,k)で表し、(1,0)の位置にペンタマーを置くと、ペンタマーのみから成る図1(a)のような正20面体ができます。ここで、大きさによって正20面体を一義的に定めるパラメータとして、T数(triangulation number)が定義されます:

$$T = h^2 + hk + k^2$$

ここで、h,kは任意の正の整数です。

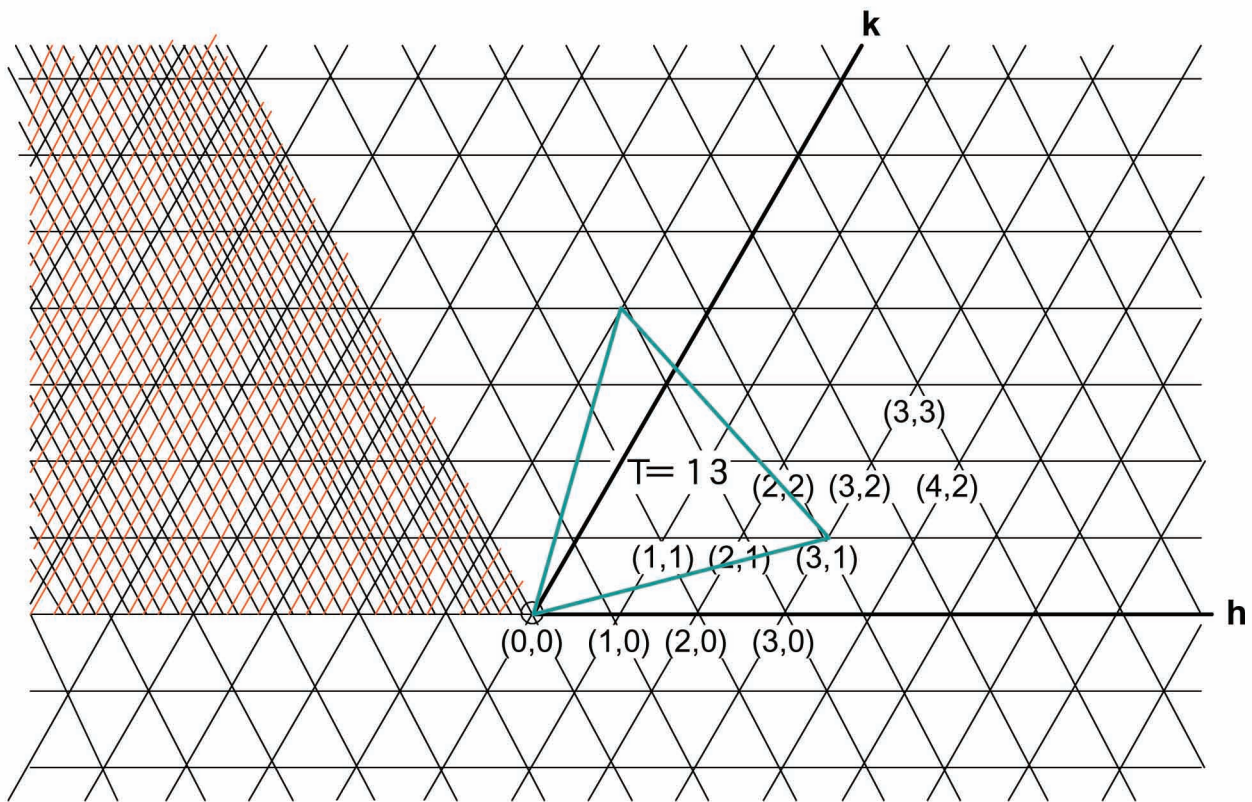


図2.

p6ネット。任意の格子点を原点に選んでそこを5回対称の点、即ち、ペンタマーを置く点とする。T数は原点から最も近いペンタマーの位置(h,k)によって $T=h^2+hk+k^2$ で定義される。緑の正三角形で $T=13$ の例を示してある。

T数は1,3,4,7,9,12,13などのとびとびの値を取ります。図3にはh軸とk軸に挟まれた60度の領域が示してあります。T数は正二十面体の各面に含まれる基本小三角形の数、 $S=\sqrt{T}$ は一辺の長さを表すことが容易に示されます。図1(a)(b)にT=1とT=4の場合の球殻構造の例が描いてあります。hかkのいずれかが0の場合、またはh=kの場合にはT数で構造が一義的に決まりますが、それ以外の場合、即ち、hもkも0でなく、しかも $h \neq k$ の場合には、右巻き(d)と左巻き(l)の2通りが考えられます。例えば、 $\lambda$ フェージやT4フェージはそれぞれ $T=7|$ と $T=13|$ で左巻きですが、ポリオマウイルスでは $T=7d$ で右巻きです。

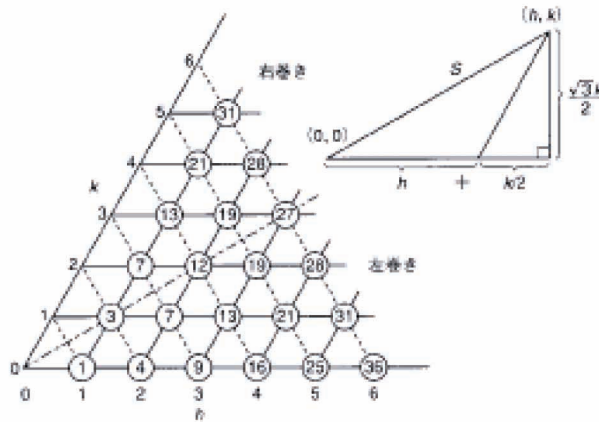


図3.T数、左巻きと右巻き、T数と正二十面体各辺の長さの関係

なお、T4フェージなど、正20面体でなく、5回対称軸の方向に伸びた頭部 (prolate icosahedral) を持つフェージもあります。正二十面体は5回対称軸を紙面内上下方向においたとき、上下のキャップと側面に分けて考えることができます (図4)。T4フェージのキャップは $T=13$  ですが、側面はQ数で定義される3角形によって規定されます。図5にT4フェージの側面を表す $Q=212$ を、まれに見られる $Q=13$  (isometric)、 $Q=17$  (intermediate)、 $Q=13$  (petit)と共に示してあります。Q数は、T数と同じく、当該の側面の3角形に含まれる小3角形の数を表しますが、T数と違って連続した正の整数の値をとることができます。

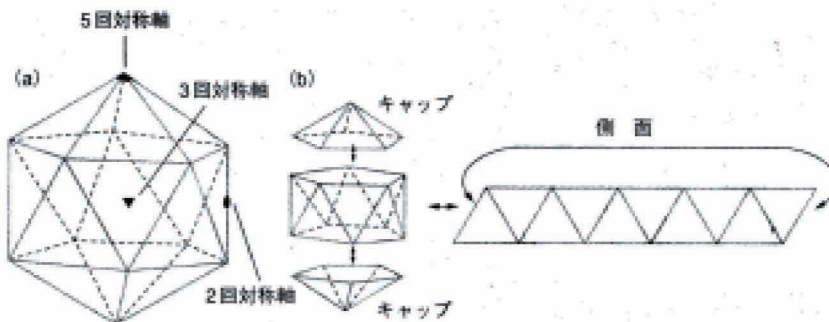


図4.正20面体のキャップと側面



図5. T=13のキャップにQ=21、17、13(=T)の側面がある例

## 準等価性理論とウイルス頭殻の精密構造

その後、いくつかの球状植物ウイルスの高分解能X線結晶解析の結果が報告され、その結果、理論に概念上の修正が必要になってきました。“準等価性”の考え方は、元来サブユニット間の結合が基本的には同一であって、多少の歪を加えることによって各サブユニットの置かれた場所の非等価性、即ち、図1(b)での位置A ~ Dの相違に対処していると仮定しています。しかし、SBMV (Southern Bean Mosaic Virus) の高分解能構造を検討してみますと、各サブユニットの三次構造はほとんど同一で、そのかわりに複数の“非等価”な結合が存在することが分かりました。つまり、高次構造の歪ではなくてむしろ、異なる結合によって正20面体構造を可能にしている訳です。さらに、アデノウイルス(T=25)ではペンタマーの位置にはペンタマーでなく準5回対称軸を持つ1つのサブユニット、ヘキサマーの位置には6量体ではなく3量体が存在していることが分かりました。もうひとつの予想外の発見は、ポリオーマウイルスの構造です。このウイルスは準等価性理論の例外で、72個のキャプソマーすべてがペンタマーでした。しかし、ウイルスキャプシドの構造は現在でもほとんどが“準等価性理論”に従って、ペンタマーとヘキサマーから成っています。

注:

- 1) 例外的にT4ファージのように各頂点を形成するペンタマーが別の蛋白質から成ることもある。
- 2) 最近、T4ファージの正しいT数は20であることが明らかになった。