

## MLSCMO 法による PYP の吸収波長制御の解析

(名古屋大学大学院理学研究科\*、CREST, JST\*\*) ○川口一朋\*、倭剛久\*\*

【序】タンパク質の電子状態を求めることは、物理的、化学的性質を知る上で非常に重要である。しかし、タンパク質全体を第一原理的に電子状態を解くことは、Photoactive yellow protein (PYP)のような比較的小さなタンパク質であっても非常に困難である。そのため、これまでは階層的な手法を用いて電子状態計算が行われてきた[1]。PYPの様な光受容タンパク質は発色団で光を吸収し励起状態になる。この時、タンパク質部分の電子状態も発色団の電子状態の変化を受けて変化するはずである。この変化はあまり大きくないとして、これまでの計算では無視されてきたが、特に発色団周辺のアミノ酸残基にとっては重要である。そこで我々はこの効果を採り入れるためにMLSCMO法を開発してきた[2,3]。また、通常電子状態計算を行う際はエネルギー最適化された一点構造のみを用いてきたため、タンパク質の熱揺らぎの効果を考慮していなかった。そこで我々は電子状態計算を行う前に分子動力学シミュレーションにより構造のサンプリングを行った。この様な事を考慮して、PYPと溶媒分子を含めた10,779原子からなる大規模な系で電子状態計算を行い、吸収波長制御についての解析を行った。

【計算】PYPのX線結晶構造(PDBID:2phy)を用いて分子動力学シミュレーションにより300Kの熱平衡状態の構造サンプリングを行った。その中から10個の構造を抽出し、それぞれに対して基底状態と励起状態の電子状態計算をMLSCMO法を用いて行った。この時、(A)発色団、(B)発色団周辺の20残基、(C)それ以外のタンパク質部分と溶媒の水分子、の領域に分割して計算を行った。(A)はCASPT2法、(B)はFMO-HF法、(C)はAMBER力場パラメーターを用いた。この結果からタンパク質中の各原子が励起エネルギーに与える影響を調べ、PYPのミュータントの吸収波長の予測を行った。

【結果】電子状態計算の結果からタンパク質中の各原子が励起エネルギーにどのような影響を与えるのかを調べた(図1)。この結果から、Tyr42、Glu46、Thr50が

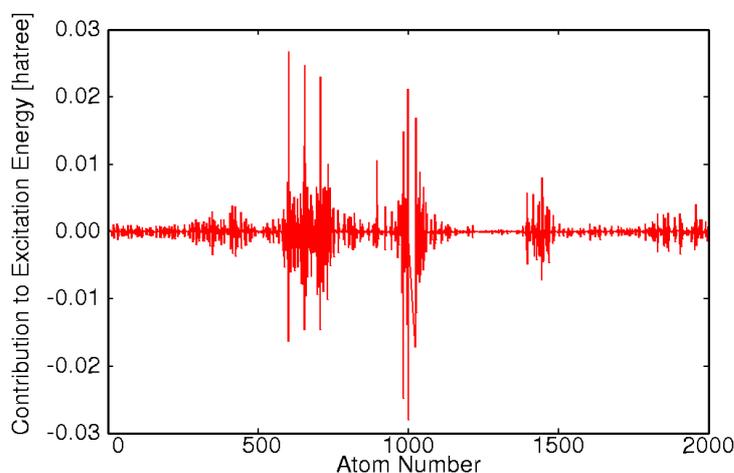


図1：タンパク質中の各原子が励起エネルギーに与える影響

らの影響が特に大きいことがわかった。またこの結果から、PYPの様々なミュータントの吸収波長を予測し、実験で知られているものとの比較を行った(図2)。

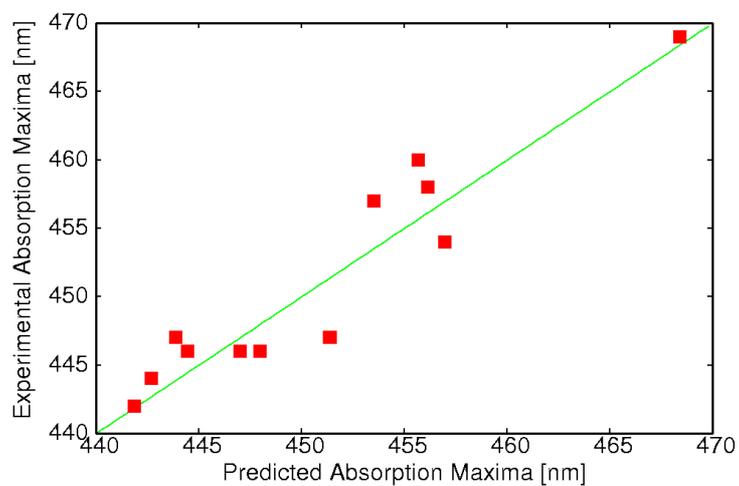


図2 : ミュータントの吸収波長予測

【参考文献】

- [1] S. Hayashi et al. *J. Phys. Chem. B* **105** (2001) 10124.
- [2] K. Kawaguchi et al. *Chem. Phys. Lett.* **430** (2006) 386.
- [3] T. Yamato et al. *Photochem. Photobiol.* **83** (2007) 323.