

分子動力学シミュレーションによる光捕集アンテナの
サブユニット B820 に関する理論的研究

(琉大院理工¹, 琉大理²) ○山内真梨江¹、東雅大²

Theoretical study on the B820 subunits of light-harvesting complexes
with molecular dynamics simulation

(University of the Ryukyus) ○Yamauchi Marie, Higashi Masahiro

【序】

光合成において光エネルギーを集める役割を担う光捕集アンテナであるLH1やLH2は、高い自己組織能力を持つ。そのため、そのサブユニットである2つのポリペプチドと2つの色素からなるB820の構造や物性は古くから研究されてきた。例えば、 α と β の2種類のポリペプチドとバクテリオクロフィル (BChl) a を構成分子として、界面活性剤の濃度を調節することによってB777からサブユニットB820へ、B820から高次会合体(B873)へと再構成が可能である(図1)。この再構成においてN末端のアミノ酸残基が重要であると考えられている[1]。また、LH1 α ポリペプチドとLH2 β ポリペプチドのように異なる光捕集アンテナ由来のB777間でもB820を形成することも知られている[2]。しかし、現在においてもB820の構造の詳細や形成過程はよく分かっていない。そこで本研究では、分子動力学(MD)シミュレーションによりLH1並びにLH2由来のB820の構造の同定を行う。さらにB820の野生体と混成体における結合自由エネルギーも計算し、実験結果と比較検討することで、再構成においてどのアミノ酸残基がどのように重要か明らかにする。

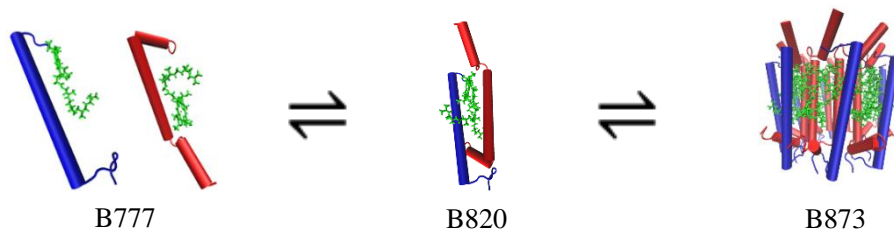


図 1. LH 複合体の会合状態

【計算詳細】

まず、*Phaeospirillum molischianum* 由来の LH2 複合体の X 線結晶構造(PDB code: 1LGH)から、過去の実験結果[1,3]から示唆されるように BChl の ring III と V が重なる形で BChl 2 分子と α ポリペプチドと β ポリペプチドを取り出し、LH2 α と LH2 β から構成される B820 の初期構造を作成した。次に、溶液中の *Rhodospirillum rubrum* 由来の LH1 α と LH1 β の構造(PDB code: 1XRD, 1WRG)を LH2 の B820 に重ね合わせて LH1 α と LH2 β から構成される B820、LH1 α と LH1 β から構成される B820 の初期構造を作成した。周囲の環境として、再構成実験で用いられるヘキサフルオロアセトン(HFA)と POPC 二重膜を用いた(図 2)。分子力場は、ポリペプチドに Amber ff99SB-ILDN、BChl と HFA に Amber GAFF、POPC に Amber LIPID14 を用いた。ユニットセルのサイズは HFA 中では $100 \text{ \AA} \times 100 \text{ \AA} \times 100 \text{ \AA}$ とし、POPC 中では $125 \text{ \AA} \times 125 \text{ \AA} \times 110 \text{ \AA}$ とした。系全体の原子数は HFA 中で約 58,000 個、POPC 中で約 150,000 個となった。計算プログラムは Amber 14 を用いた。

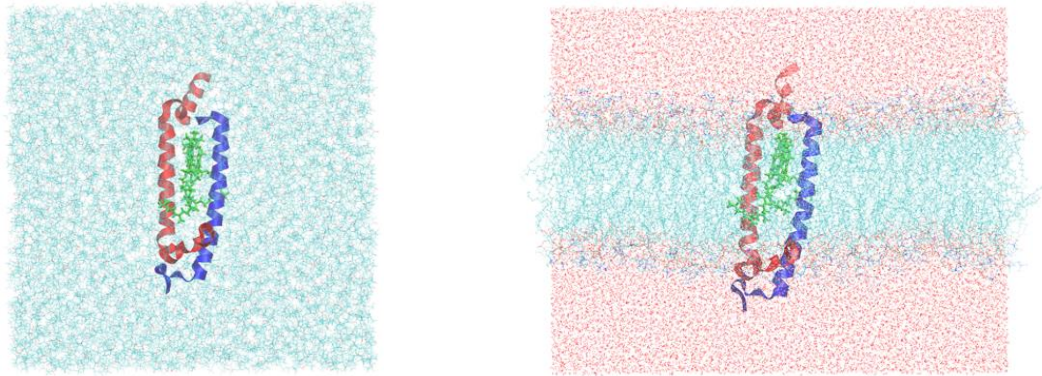


図 2. HFA (左) および POPC (右) 中の B820

【結果と考察】

50 ns の MD シミュレーションを行った後の B820 の全体像を図 3 に、各 B820 の N 末端での代表的な水素結合を図 4 に示す。まず、LH2 α と LH2 β から構成される B820 では HFA 中と POPC 中で大きな違いは見られなかった。また、LH2 複合体の X 線構造と比較して、N 末端側では α と β 間の水素結合の組み換えが見られ、より多くの水素結合が確認されたが、それ以外の箇所では α と β 間に水素結合は生成されなかった。この計算結果は実験結果と一致する。また、LH1 α と LH2 β から構成される B820、LH1 α と LH1 β から構成される B820 でも同様に N 末端で α と β 間に水素結合が生成していることが確認された。さらに、これらの B820 では C 末端でも α と β 間に水素結合が見られた。

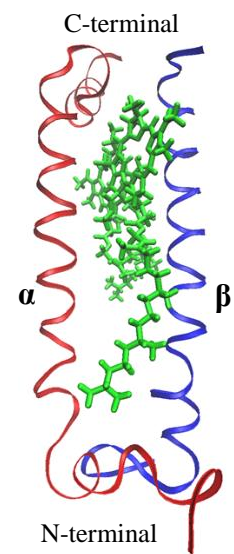


図 3. B820 の全体像

現在、アンブレラサンプリング法と Weighted Histogram Analysis Method (WHAM)を用いて B820 の結合エネルギーを計算中である。詳細は当日議論する予定である。

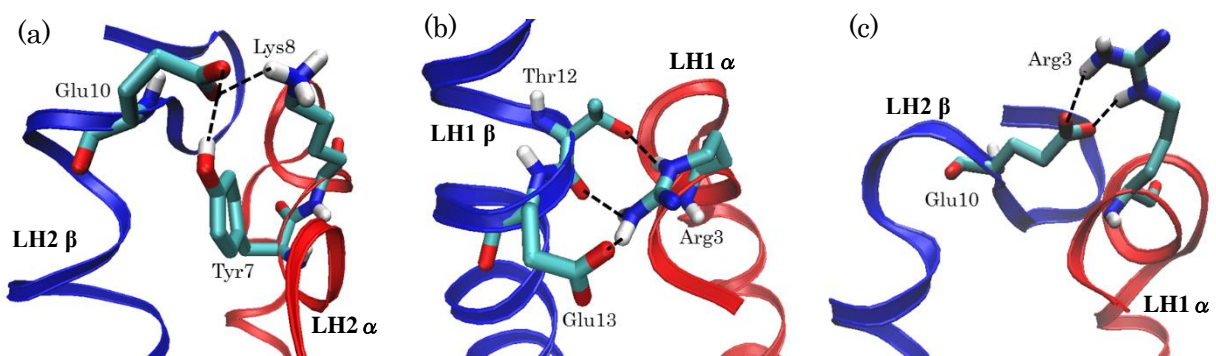


図 4. (a)LH2 (b)LH1 (c)混成体の N 末端での代表的な水素結合

参考文献

- [1] Pamela S. Parkes-Loach et al. *Biochemistry* **2004**, *43*, 7003-7016.
- [2] John B. Todd et al. *Biochemistry* **1998**, *37*, 17458-17468.
- [3] Zheng-Yu Wang et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 1072-1078.