

サーモフィリックロドプシン(TR)の熱安定性機構に関する理論的研究

(名大院理¹・名大 ITbM²) ○仁科 道也¹・藤本 和宏^{1,2}・柳井 毅^{1,2}

Theoretical Study on Thermostabilization Mechanism of Thermophilic Rhodopsin

(TR) (¹Graduate School of Science, Nagoya University, ²ITbM, Nagoya University)

○Michiya Nishina,¹ Kazuhiro J. Fujimoto,^{1,2} Takeshi Yanai,^{1,2}

Thermophilic rhodopsin (TR) is one of the retinal proteins and is known to be stable under high temperature conditions above 70°C. The thermostability of TR is thought to be due to its higher activation energy for the transition to the denatured state than those of other retinal proteins. However, the molecular mechanism for the thermostability of TR remains elusive, mainly due to the difficulty in searching for the protein structure in the transition state.

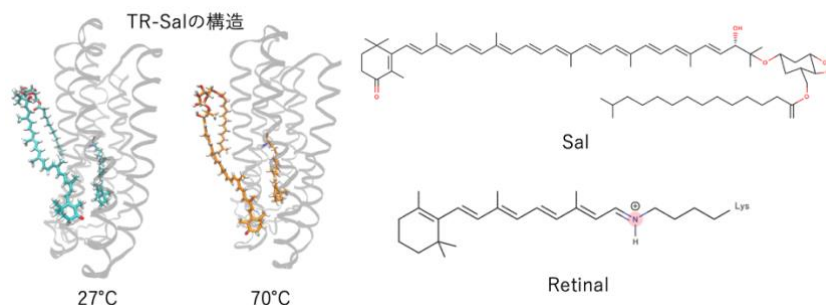
In this study, we explored the physicochemical factors contributing to the thermostability of TR by calculating the binding energy of TR to salinixanthin (Sal) and their CD spectra. The calculations confirmed that TR can retain its protein structure more stably than xanthorhodopsin (XR) at 70°C. Further analysis revealed that TR can bind Sal more strongly than XR at 70°C.

Keywords : Molecular Dynamics Simulation; Thermophilic Rhodopsin; Free Energy;

Quantum Chemical Calculation; CD Spectra

レチナールタンパク質の一種、サーモフィリックロドプシン (TR) は 70°C 以上の高温条件においても安定な光受容タンパク質である。TR の熱安定性は、変性状態への遷移に必要な活性化エネルギーが他のレチナールタンパク質と比べて高いことに起因すると考えられている¹⁾。しかしながら、遷移状態におけるタンパク質構造の探索の困難さなどにより、TR の熱安定性に関する分子機構は不明のままである。

本研究では、カロテノイドの一種であるサリニキサンチン (Sal) を用いて TR と Sal の結合エネルギーや CD スペクトルを計算することで、TR の熱安定性に寄与する要因を探った。計算の結果、TR は他のレチナールタンパク質である XR と比べ、70°C の高温条件下でもタンパク質構造が高く保持されることが確認できた。さらなる解析から、70°C において TR は XR よりも Sal と強く結合できることが明らかとなった。本発表では結合自由エネルギーや構造の特徴について詳細に議論する。



1) Thermal and spectroscopic characterization of a proton pumping rhodopsin from an extreme thermophile. T. Tsukamoto, K. Inoue, H. Kandori, Y. Sudo, *J. Biol. Chem.* **2013**, 288, 21581.