

天然ゴム中タンパク質とイソプレン鎖の末端部との FMO 相互作用解析

FMO-based analysis on interactions between rubber protein and isoprene chain ω-end

立教大理¹, 東大生研², 星薬科大³, (株)ブリヂストン⁴

○阿部鷹也¹, 奥脇弘次¹, 望月祐志^{1,2}, 福澤薫^{2,3}, 佐藤弘一⁴

Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo², Hoshi Univ.³, Bridgestone (Ltd)⁴

○Takaya Abe¹, Koji Okuwaki¹, Yuji Mochizuki^{1,2}, Kaori Fukuzawa^{1,3}, Hirokazu Sato⁴

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】 今日、様々な合成ゴム素材が多様な成形品として利用されています。しかし、航空機の離着陸装置のタイヤなど高い力学的・温度的負荷がかかる場合、依然として天然ゴムが素材として用いられています。高い強度の要因として天然ゴム中のタンパク質とイソプレン鎖(さらに脂質)の結合が注目され、基礎的な研究がなされています(例えば[1-3])、原子・分子レベルでの理解は十分とは言えない状況です。そこで、今回、天然ゴムのアレルゲンとして知られるタンパク質[4]を取り上げ、イソプレン鎖の末端部との結合・相互作用を ABINIT-MP プログラムを用いた FMO 計算[5]でモデル的に解析することにしました。

【モデルと計算手法】 文献[4]の PDB-id=4HPG をダウンロードし、4 量体から 2 番の単量体を取り出し、MOE[6]を使って図 1 のモデルのドッキング構造群を生成しました。これらに、相互作用の成分分析[7]を含む FMO-MP2(PR)/6-31G*計算を行いました。

【結果】 図 2 に相互作用エネルギーが -46 kcal/mol と最大となった結合サイト 2 を示しますが、安定化には Glu が効いています(黄色がイソプレン側)。他のサイトの安定化でも、正負共に荷電性残基の寄与が大きいことが見られました。相互作用の内訳としては、静電安定化が主導的ですが、電荷移動や分散力的な相互作用も補助的に働いています。当日は別のリガンドモデルでの結果もお示しします。

【謝辞】 本研究は、文科省 FS2020 プロジェクト重点課題 6、科研費(16H04635)から支援されています。

【参考文献】 [1] Ariyawiriyanan et al., Energy Proc., 34 (2013) 728. [2] Wei et al., MOJ Poly. Sci., 1 (2017) 197. [3] Kitaura et al., Macromol. Chem. Phys., 219 (2018) 1700331. [4] R.-Romero et al., Acta Cryst. Sect. D, 70 (2014) 329. [5] Tanaka et al., Phys. Chem. Chem. Phys., 16 (2014) 10310. [6] <<https://www.chemcomp.com/>>. [7] 塚本ら, J. Comp. Chem. Jpn., 14 (2015) 1.

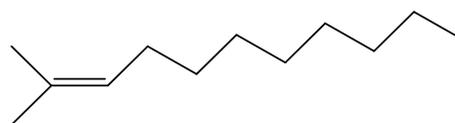


図 1. イソプレン鎖の末端部モデル

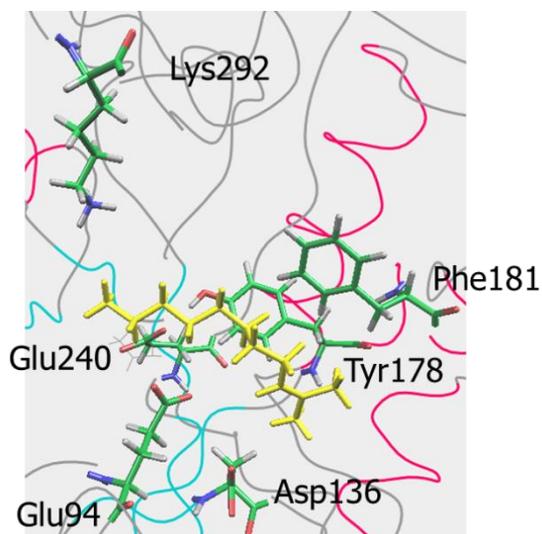


図 2. PDBid=4HPG の単量体の結合サイト 2 への結合の様子