天然光合成 PSII に学ぶ水の酸化反応

Learning from PSII, Water Oxidation

○中村 振一郎 (理化学研究所)

Shinichiro Nakamura (RIKEN)

E-mail: snakamura@riken.jp

進化の過程で淘汰されてきた光合成システムは、巨大タンパク全体が動的に水酸化の反応触媒中心(OEC)を揺すりながら機能している。この全体プロセスを定量的に理解するために、沈らが報告したX線構造をもとに、Co-Factors等の不足情報を全て補い、新たに力場を構築し、水を含む合計120万原子からなる系の古典MDを実行した。緒方浩二らによって実行されたこの結果(文献1)を中心に報告する。解析に用いるPSII蛋白質の系のモデルは、チラコイド膜のモデルの中にPSII二量体を配置したものである。PSII二量体はPDBに登録された高分解能のものを用いている。また、チラコイド膜のモデルは脂質の組成(MGDGとDGDG, SQDG, PGの割合と付加している脂肪酸の割合)がシアノバクテリアのものになるべく近くなるように作成したものを用いた。これは天然の状態に近いモデルである。PSIIとチラコイド膜のモデルは大きな水のボックスに配置し、その系に対して古典分子動力学を行っている。従って、古典分子動力学シミュレーションで得られるスナップショットは自然の状態を可能な限り再現できていると考えられる。

この巨大タンパクPSII全体の動きを古典MDで理解したのち、OEC部分を量子化学計算QM/MMによって詳細解析を試みた。暗所で安定な構造S1から出発し、S2を経て、現在S3の構造まで到達しつつある。ここから2分子の水から1分子の酸素が生成される。この現象は非常に精妙なタンパクとMn原子上のスピン化学の協奏過程である様子が浮かび上がってきた。この詳細を報告する。

参考文献

K.Ogata, T.Yuki, M.Hatakeyama, W.Uchida, S.Nakamura, J.Am.Chem.Soc.,135(2013)15670.