大腸菌べん毛モーターの圧力制御によるスイッチング機構の解明

High pressure inhibits signaling protein binding to the flagellar motor and bacterial chemotaxis through enhanced hydration

東工大¹, 東大², 近大³, 法政大⁴

畑宏明¹, 西原泰孝², ○西山雅祥³, 曾和義幸⁴, 川岸郁朗⁴, 北尾彰¹

Tokyo Inst. Tech.¹, Univ. Tokyo², Kindai Univ.³, Hosei Univ.⁴

Hiroaki Hata¹, Yasutaka Nishihara², Masayoshi Nishiyama³, Yoshiyuki Sowa⁴,

Ikuro Kawagishi⁴ & Akio Kitao¹

E-mail: mnishiyama@phys.kindai.ac.jp

大腸菌は体外に伸張させたべん毛繊維を根元にある回転器官・べん毛モーターで回転させることで水溶液中を泳いでいる。べん毛モーターの回転方向は、応答制御因子であるリン酸化 CheY がモーターを構成する FliM に結合することで、ダイナミックに逆転することが知られている。大腸菌の走化性応答野生株 RP437 株を高圧力下で観察すると、40MPa 以上の圧力下では、モーターは CCW 方向にのみ回転することが明らかになった。一般に、高圧力下ではタンパク質—タンパク質分子間やタンパク質—リガンド間の結合力が弱まるので、解離反応が促進することになる[1-2]。これは、高圧力下でリン酸化型 CheY とモーターの結合力が弱まり解離してしまうことを意味する。そこで、本研究では、CheY と FliM の結合状態を調べるため、高圧力下で CheY-FliM 複合体のMD計算を実施した[3]。

まず、CheY および FliM について数マイクロ秒程度 MD 計算を実施したところ、100MPa の圧力下であっても CheY と FliM の分子構造は大きく変化しないことが確認された。次に、カスケード型超並列シミュレーション PaCS-MD を用いて、CheY が FliM から解離する過程を圧力を変えて観察した。さらに、得られた MD トラジェクトリをマルコフ状態モデルによって解析し、CheY と FliM の結合自由エネルギーを求めた。その結果、結合エネルギーは圧力の上昇とともに小さくなり、実験結果を支持する結果が得られた。この高圧力下でみられる結合エネルギーの低下はタンパク質水和の変化が原因であると考えられる。

【参考文献】

- [1] 西山雅祥, *高圧力の科学と技術* **25** (2) 126-135 (2015).
- [2] 西山雅祥, 瀧口金吾, 林真人, *顕微鏡* **51** (2) 118-121 (2016).
- [3] Hata et al., *Sci Rep.* **10**(1), 2351 (2020). doi: 10.1038/s41598-020-59172-3.