

分子シミュレーションから探る Photoactive Yellow Protein の光応答とダイナミクス

photoactive yellow protein (PYP)は、紅色光合成細菌の負の光走性を司る受容体といわれている。PYP は多くのセンサーおよびシグナル蛋白質に共通に見出される PAS ドメインを含む。それゆえ、PYP の光応答を分子レベルで解くことは、PAS ドメインを用いた様々なシグナル伝達機構を解明することにつながる。PYP は 446 nm の光を吸収し、発色団クマル酸チオエステルのビニル結合が trans から cis 型に異性化する。これが引き金となり一連の光反応中間体が生成し光サイクルが回る。中間体の中でも ms オーダで生成する M 中間体は、シグナル伝達状態といわれている。一般にシグナル受容体の機能発現機構を理解するためには、局所的なサイトでの刺激受容がどのようにして蛋白質全体の構造やダイナミクスの変化を誘起するのか解明しなければならない。本研究では、分子動力学シミュレーションを用いて、発色団の異性化という刺激が PYP 蛋白質全体のダイナミクスにどのような変化を誘起するかを調べた。その結果、M 中間体は特徴的な hinge-bending motion をもつことが見出された。