

二酸化炭素固定酵素 Rubisco 改変のための フラグメント分子軌道計算

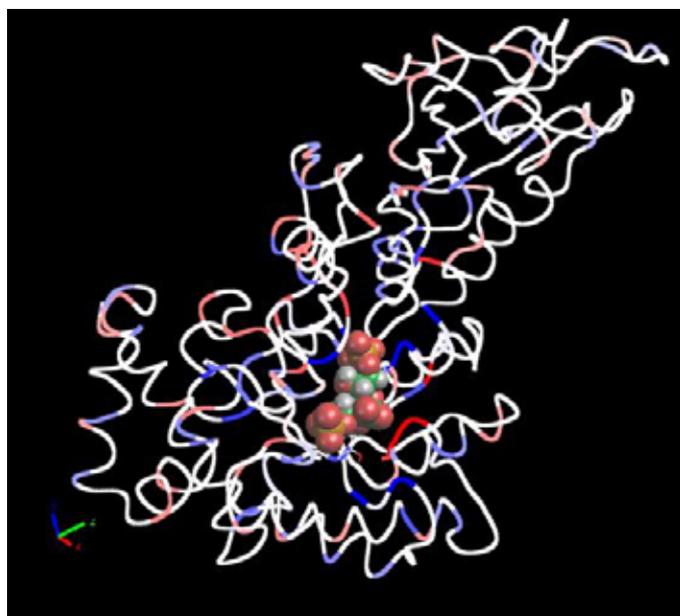
渡邊 博文^{1,3}、田中 成典^{1,2,3}、杉村 乾次²、武石 祥史²、榎本 平^{1,2}

¹神戸大学大学院自然科学研究科(〒657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1)

²神戸大学発達科学部(〒657-8501 神戸市灘区鶴甲 3-11)

³科学技術振興機構(JST) CREST

京都議定書の発効後、地球温暖化問題への関心は日増しに高まっており、その解決策として植物の光合成による二酸化炭素の固定反応の効率を高め大気中の二酸化炭素を回収することは有力な手段の一つと考えられる。光合成反応においてリブローズビスリン酸カルボキシラーゼ(Rubisco)の触媒する反応は、二酸化炭素と水とリブローズ 1,5 ビスリン酸から二分子の 3-ホスホグリセリン酸を得る過程である。これは炭素固定化の律速段階となっており、この部分の効率化は炭素固定化率の向上に大きく寄与することが期待される。本研究では、実際にRubiscoを改変する際の指針を得ることを目的とし、その結果に基づいて実験的に改変を行うことが計画されている。この反応の遷移状態の構造やエネルギーについての量子化学的計算はすでに行われているが^{1,2}、反応に関係すると思われる数十原子のみを抜き出したものであり、周辺の原子の影響を取り入れていない。そこで本研究ではフラグメント分子軌道法を用いてタンパク質全体を含んだ系に



ついて解析を行う。フラグメント分子軌道法はタンパク質や核酸をフラグメントに切り分け、そのフラグメントとフラグメントペアに対して量子化学計算を行うことで、系全体のエネルギーや電荷密度、フラグメント間の相互作用エネルギーなどを評価することが出来る。この方法を使えば、周辺のアミノ酸残基置換の効果も取り入れることができ、より精度の高い予測が期待できる。まずは、残基置換をしない場合の酵素反応の解析をフラグメント分子軌道法を用いて行い、次に残基置換の効果について議論する。

Rubisco と遷移状態アナログ 2-CABP の相互作用解析

赤は斥力、青は引力を表す

¹W. A. King, J. E. Gready and T. J. Andrews, *Biochemistry* **1998**, 27,15414-15422.

²H. Mauser, W. A. King, J. E. Gready and T. J. Andrews, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123,10821-10829.