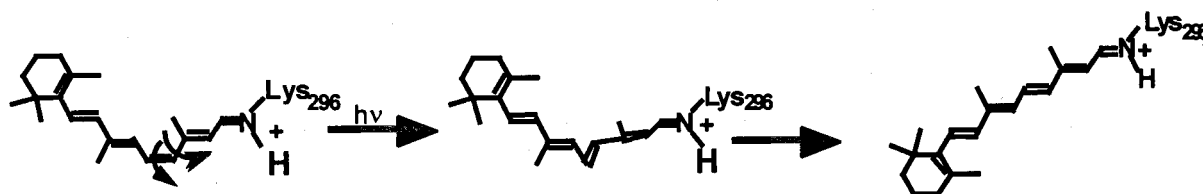


Masaji Ishiguro, Takahiro Hirano,† In Tek Lim, Don Moon Kim, Kazuo Yoshihara, Yoshinori Shichida†
Suntory Institute for Bioorganic Research, & †Department of Biophysics, Kyoto University

The photo-isomerization of the retinylidene chromophore and the process of thermal relaxation of its strained conformation were examined by restrained molecular dynamic simulations in the transmembrane model of rhodopsin. This model was constructed based on the crystal structure of rhodopsin. The photo-conversion process from the 11-cis-retinylidene chromophore to the all-trans chromophore was traced by simultaneous rotation of the adjacent C12-C13 bond, leading to an all-trans chromophore having a twisted conformation at the C11-C12 and C12-C13 bonds for the bathorhodopsin chromophore. In accord with the characteristic CD signals at 500 and 540 nm, the retinylidene chromophore of rhodopsin and bathorhodopsin showed characteristic right-handed and left-handed helical conformations, respectively. The photo-isomerization of the 9-cis-retinylidene chromophores with a *trans* C11-C12 double bond-locked structure and an *s-trans* C12-C13 bond-locked structure suggested an importance of the structural change of opsin in the formation of pigments.



名大院生命農 ○小野寺 健一・大場裕一・中村英士・小鹿 一

単細胞藻類の渦鞭毛藻はパリトキシンやシガトキシンといった分子量が大きく、生理活性の強い化合物を産生することで知られている。我々は以前の研究で、渦鞭毛藻 *Symbiodinium* sp. の Y-6 株からカルシウムイオンの膜透過性を高めることにより血管収縮作用を示す Zootoxanthellatoxin (ZT) を得ている。この化合物は大環状ラクトン構造を有するポリオール化合物で、その特異な構造と活性との相関解明に興味をもたれる。

今回、ZT 類縁体探索の過程で *Symbiodinium* sp. の HA3-5 株より C1H と仮称する新たなポリオール化合物を得た。これまでの解析の結果、この C1H は分子量が ZT と近いものの構造的には異なり、ZT に見られた大環状ラクトンを有せず直鎖構造をとっていること、また酸化段階も ZT より低いことが推定された。現在、NMR と分解反応による構造の詳細を解析中なので、これまでに判明した構造の知見について報告する。さらに分画の過程で C1H 類縁体も数種類得られてきており、これらの構造と活性を検討中である。