

課題名 (タイトル) :

レプリカ交換法による膜蛋白質の立体構造予測

利用者氏名 : 岡本祐幸

所属 : 和光研究所 基幹研究所 杉田理論生物化学研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

トランスロコンとよばれるタンパク質を膜の中に埋め込むたんぱく質である SecYE という膜の中に存在するタンパク質は、二量体構造で機能することが分かっている。その単量体構造は実験的に分かっているが、二量体構造はいまだに結晶構造は知られていない。ただし、相互作用を実験的に調べたり、電子顕微鏡により有力なモデルは提唱されている。本研究では、その二量体構造を、シミュレーションにより理論的に予測するのを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

レプリカ交換モンテカルロ法をもちいることにより、単量体構造を二つ並べて、それを初期構造として計算をおこなった。各単量体の主鎖は剛体として扱い、剛体の平行移動と回転により配位空間を探索した。また、側鎖は自由に動かした。

3. 結果

計算結果をまとめると、まだ、仮の結果ではあるが、我々のシミュレーションで得られた、最小自由エネルギー構造が、単量体の構造を決めた実験グループの提唱した 2 量体構造モデルと一致することが分かった。

4. まとめ

SecYE という膜たんぱく質は、その機能構造である二量体構造が実験的に分かっている。それを理論的に予測することができようとしている。

5. 今後の計画・展望

二量体構造をとる形が判明した場合、なぜそのような構造をとるのか相互作用の情報があると望ましい。よって、相互作用などの種類別の解析を行いそれらを明かにすることである。その際、より多くの情報があるとのぞましいので、

計算をより多く行い情報を増やす必要がある。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

二量体構造の構造空間の探索は順調に行われているが、系が大きいため、十分なデータをとるには長い計算時間が必要である。よって引き続き、計算を行い、いくつかの初期構造から計算を行い、探索結果の確認を行いたい。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

【国際会議などの予稿集、proceeding】

【国際会議、学会などでの口頭発表】

岡本祐幸「計算機シミュレーションによる生体分子科学研究」岡崎統合バイオサイエンスセンター10周年記念シンポジウム、岡崎市、2011年2月10-12日

【その他】