

課題名 (タイトル) :

## 糖鎖インフォマティクス

利用者氏名 : 加藤 雅樹

所属 : 和光研究所 基幹研究所 ケミカルバイオロジー研究領域 システム糖鎖生物学研究グループ  
糖鎖構造生物学研究チーム

## 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

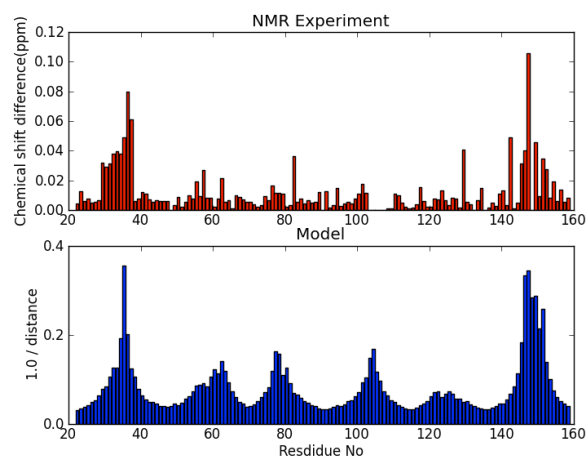
ZG16p は、バクテリア由来の  $\alpha$ -マンノースおよび  $\beta$ -グルカンを認識している可溶性のほ乳類レクチンで、当研究室により X 線結晶解析で立体構造が決定された (pdbcode:3apa)。Bacterial glycan-directed microarray による解析により、ホスファチジルイノシitolをもつ単糖および二糖の PIM1 と PIM2 に結合することが明らかになったが、ZP16p と PIM1 および PIM2 との詳細な分子相互作用様式は決定されていない。そこで、本課題では ZG16p と PIM1 および PIM2 との複合体の分子動力学計算を行い、詳細な分子相互作用の解析を試みた。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

初期構造は pdbcode:3apa を用い、PIM1 および PIM2 は pdbcode:2gaz を利用した。myPresto を用いて水溶液中での複合体のエネルギー最小化をおこなった。水分子は TIP3P モデルを使用し、約 2,6000 分子からなる三次元的な周期性を持った水の球に全体を入れた。極小化後の複合体モデルを初期構造として、myPresto を用いて水溶液中における分子動力学計算を温度 300 K、タイムステップ 1 fs で 2 ns 行なった。分子力場パラメータとしては amber99 を、またリガンド分子に対しては GAFF を使用した。

## 3. 結果

分子動力学計算の結果、35,36,104,146~150,160 番目のアミノ酸が ZG16p と PIM1 および PIM2 が結合に関与していることが示唆された。これは NMR 実験の結果とよく一致していた(下図)。



## 4. まとめ

分子動力学計算により、ZG16p と PIM1 および PIM2 との結合様式を明らかにした。この結果は NMR 実験の結果と合致する。

## 5. 今後の計画・展望

糖鎖を認識するタンパク質の多くはその分子認識機構がよくわかっていない。今後は同様の分子動力学計算を行い、様々なタイプのレクチンの糖鎖認識機構の解明を行う予定である。