

提出日：平成 30 年 5 月 18 日

平成 29 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

(2) 研究成果の概要

課題名	固体 NMR と分子動力学法を組み合わせた立体構造解析		
研究代表者	氏名	亀田倫史	
	所属機関名・部局名	産業技術総合研究所・人工知能研究センター	
	職名	主任研究員	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	超高磁場 NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	藤原敏道		
<p>昨年度、常磁性を持つイオン Gd³⁺ を蛋白質（ユビキチン）上に付加したタグに結合させ PRE 測定を pH6~8 で行った観測データを組み合わせた立体構造決定法を検討したところ、ユビキチンの立体構造を通常の方法と比べ、より細密に決定できることを示した。pH=6,8 での MD シミュレーションにより、pH に応じてユビキチンの立体構造は変化せず、Gd³⁺ タグの位置のみが変化することを示し、pH=6~8 での測定は、複数の異なるタグを用いた測定を行ったことに相当することを確認した。</p> <p>本年度は、本手法を他の蛋白質に適用し、その汎用性を確認する研究を行った。すると、N 末端にタグ（PhDTA）修飾した場合は、ランタニド金属イオンからの PCS がユビキチンの場合と同程度の変化量として観測されたものの、N 末端キレート部位へランタニド金属イオンが結合しにくく、多くの場合で均一なサンプルが調製できなかった。また、ユビキチンの場合にみられた PCS の pH 依存的な磁気異方性の変化が、有意に観測されなかった。そのため、残念ながら、現状では本手法の汎用性は担保されないという結果に終わった。今後はこの点の改良と、構造解析用ツール以外への適用などを研究する予定である。</p>			

※本様式は、“拠点事業成果報告”として、拠点ホームページにて公開させていただく予定です。

※必ず A4 用紙 1 枚におさめて下さい。 ※提出期限：平成 30 年 5 月 18 日（金） ※提出の際は PDF 変換して下さい。

※提出先：大阪大学蛋白質研究所拠点プロジェクト班 E-mail: tanpakuken-kyoten@office.osaka-u.ac.jp