

提出日：2019年 5月 15日

平成 30 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	分子動力学シミュレーションによるダイニンストークの熱安定性の評価		
研究代表者	氏名	神谷 成敏	
	所属機関名・部局名	兵庫県立大学大学院・シミュレーション学研究所	
	職名	特任教授	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	○	共同研究員	
		超高磁場NMR 共同利用研究課題	
		クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
		客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	栗栖 源嗣		
<p>ダイニンストークの構造探索をマルチカノニカル分子動力学(molecular dynamics, MD)シミュレーションを用いて行った。マルチカノニカル MD は常温から高温をランダムウォークする拡張アンサンブル法の一つで、局所構造にトラップされることなく広い構造空間を探索することができる。タンパク質は高温状態でアンフォールドするので、天然構造周辺の構造空間を探索するためには構造を拘束する必要がある。拘束が弱すぎれば構造が崩壊し、強すぎればほとんど動かないことになるので、本研究では拘束条件の検討を行った。ここでは、二次構造を保持するために天然構造で水結合を形成しているペアを距離拘束した。これに加えて、N 末、C 末が大きく壊れないように、N 末、C 末の Cα原子に距離拘束を施した。280 K から 700 K の広い温度領域において平らなポテンシャルエネルギーの分布が得られマルチカノニカル MD は正常に動作した。得られた常温の構造を解析したところ、コイルドコイル構造の微小管結合部位に近接した領域で大きな構造揺らぎが見られた。他方、コイルドコイル構造の N 末、C 末領域では揺らぎは小さく、また、コイルドコイル構造のレジストリの変化は見られなかった。今後は計算モデルや拘束条件を詰めていきたい。</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：令和元年 5 月 17 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