

課題名 (タイトル) :

## Glycoinformatics

利用者氏名 : ○加藤 雅樹

所属 : 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

糖鎖のタンパク質による認識機構の解明には、糖残基の水酸基間や水分子との水素結合の理解が欠かせない。また、糖鎖残基は一般に柔軟な構造をしていると考えられているが、そのダイナミクスを定量的に理解することは重要なことである。本研究では異性体の関係にある2つのモデル糖鎖を対象にして、分子動力学 (MD) 計算を行い、糖鎖のコンフォメーションとダイナミクス・水素結合についての解析を行った。

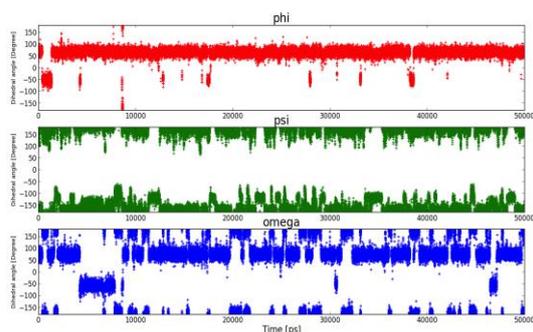
## 2. 具体的な利用内容、計算方法

モデル糖鎖として Neu5Ac(2-6)Glc と Neu5Ac(2-6)Gal を対象として、amber を用いて MD 計算をおこなった。

力場は Glycam06 を使い、陽溶媒中で NVT シミュレーションを行った。

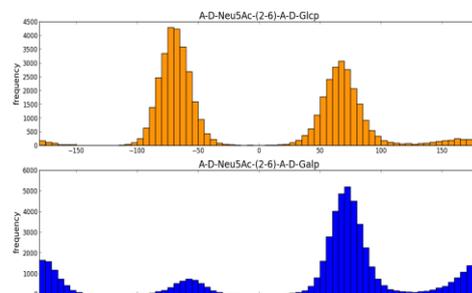
## 3. 結果

下の図で Neu5Ac(2-6)Gal のタイムステップ毎のグリコシド結合まわりの2面角  $\phi$ 、 $\psi$ 、 $\omega$  角を示す。



$\phi$ 、 $\psi$  角は時間変化に乏しく一定の値を示すのに対して、 $\omega$  角は2面角の遷移の頻度が高く、揺らぎが大きいことを示している。

下図で Neu5Ac(2-6)Glc と Neu5Ac(2-6)Gal の  $\omega$  角の分布を示す。



青の Neu5Ac(2-6)Gal の  $\omega$  角は主に gauche-trans に対応する2面角に分布しているのに対し、黄色の Neu5Ac(2-6)Glc の  $\omega$  角は gauche-gauche, gauche-trans に対応する2面角に分布していることが明らかになった。4位の Gal/Glc 部分の水酸基の立体配置が異なることから、4位の水酸基と Neu5Ac との水素結合の形成の違いにより  $\omega$  角の分布が異なると考察した。

## 4. まとめ

MD 計算を行った結果、Neu5Ac(2-6)Glc と Neu5Ac(2-6)Gal はダイナミクスが異なっていることが示された。

## 5. 今後の計画・展望

今後は NMR 測定により得られる実験結果 ( $^3J_{\text{H-H}}$  NOE) との比較を行う予定である。また、多くの二糖、三糖を用いて MD 計算を行う予定である。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

**【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】**

2013 日本糖質学会

**【その他】**