

課題名 (タイトル) :

グライコインフォマティクス

利用者氏名 : 加藤 雅樹

所属 : システム糖鎖研究グループ糖鎖構造チーム

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

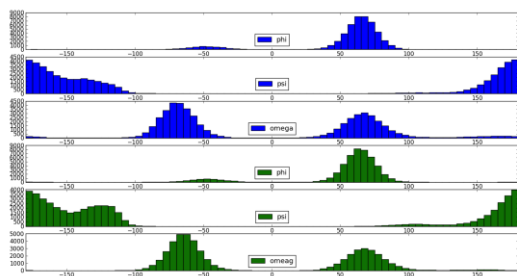
糖鎖のタンパク質による認識機構の解明には、糖残基の水酸基間や水分子との水素結合の理解が欠かせない。また、糖鎖残基は一般に柔軟な構造をしていると考えられているが、そのダイナミクスを定量的に理解することは重要なことである。本研究では異性体の関係にある 2 つのモデル糖鎖を対象にして、分子動力学 (MD) 計算を行い、糖鎖のコンフォメーションとダイナミクス・水素結合についての解析を行った

2. 具体的な利用内容、計算方法

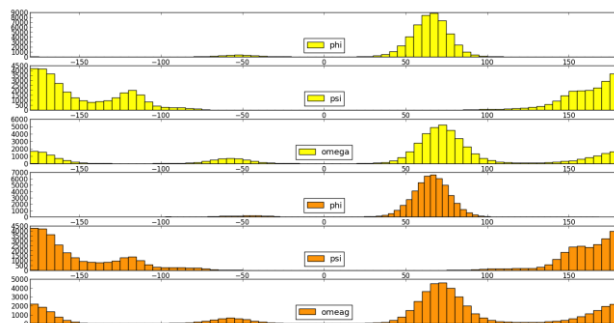
モデル糖鎖として Neu5Ac (2-6)Glc, Neu5Ac (2-6)GlcNAc, Neu5Ac (2-6)Gal, Neu5Ac (2-6)GalNAc を対象として、amber を用いて MD 計算をおこなった。
力場は Glycam06 を用い、陽溶媒中で NVT シミュレーションを行った。

3. 結果

下図で Neu5Ac (2-6)Glc (青色) と Neu5Ac (2-6)GlcNAc (緑色) の ϕ , ψ , ω 角の分布を示す。



同様に下図で Neu5Ac (2-6)Gal (黄色) と Neu5Ac (2-6)GalNAc (オレンジ色) の ϕ , ψ , ω 角の分布を示す。



グラフから Neu5Ac (2-6)Glc と Neu5Ac (2-6)GlcNAc, Neu5Ac (2-6)Gal と Neu5Ac (2-6)GalNAc のそれぞれの ϕ , ψ , ω 角の分布はほぼ一様であることが見て取れた。また、Neu5Ac (2-6)Glc と Neu5Ac (2-6)Gal の角度の分布は異なっていることが見て取れた。この違いは、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 ω 角の分布が異なると考察した。また、構造の N-Acetyl 基の部分に関しては構造の揺らぎにはあまり寄与していないと考察した。

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。