

課題名 (タイトル) :

レプリカ交換法による膜蛋白質の立体構造予測

利用者氏名 : 岡本 祐幸

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 杉田理論生物化学研究室

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

生体膜に存在する膜タンパク質は膜の中に挿入するとき、多くの種でトランスロコンとよばれる 2 量体を形成している膜タンパク質の中を通過して膜の中に挿入される。しかし、その機構はいまだ不明点が多い。そのため構造情報によるアプローチが求められるが、立体構造について単量体は高精度の結晶構造があるが、2 量体構造は精度の高いものがなく、その予測構造は議論がわかれている。本研究では、そのため、その単量体構造をもとにして、2 量体構造の予測を行うことを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

計算方法はレプリカ交換モンテカルロ法を用いた。これにより並列計算はレプリカの数である 64 個を行った。さらに初期構造として、単量体の向きがことなる 4 つの初期構造を用いて、計算を行った。一度の計算で 72 時間の使用をおこない 300 万モンテカルロステップの計算を行った。これを各初期構造毎に 15 回行なっている。

3. 結果

エネルギーの低い安定な構造は、予測される 2 量体構造の 1 つのモデルに相当する構造であった。

4. 今後の計画・展望

計算のトラジェクトリは多くなったが、これからはこれらのデータを解析する必要がある。

5. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容データの解析で色々な物理量、例えば慣性半径やコンタクトオーダーなどを計算するのに時間がかかるので、使わせていただきたい。

6. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

計算時間は十分にいただけたが、プログラムの並

列化が効率良く使えなかったため十分な演算時間を持ちられなかった。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

データの解析が十分に行えず、結果の立証が不十分であると考えられたため、発表はまだ行われていない。