

課題名 (タイトル) :

NMR データによるたんぱく質の構造多形解析

利用者氏名 : 山崎俊夫

所属 : ライフサイエンス技術基盤研究センター 構造・合成生物学部門 NMR施設

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	されれば良いなど、長い計算を進めている。新しいシステムの performance に期待したい。
NMR から得られる水素原子間の距離情報の集まりからタンパク質などの複雑な分子の構造を計算することができる。しかし、分子量が大きくなるにしたがって、信号が弱くなることと信号が重なることで、情報が不足する。経験的力場で低い構造エネルギーになることと、実験データを満たすように計算する。ただし、分子鎖が長いため絡まることを避けるために、次元を増やす工夫をした。構造多様性を反映した構造計算にまで発展させたい。	
2. 具体的な利用内容、計算方法 計算途中で人為的な 4 次元目を導入することで、分子鎖の絡まりを避けるようにした。Particle Mesh Ewald 法を 4 次元でも計算できるようにした。multicanonical 法と組み合わせられるようにし、simulated annealing と比較した。	
3. 結果 4 次元の MD 計算では、絡まりを避け効率よく、立体構造を計算することができた。multicanonical 法と simulated annealing 法を比べたところ、simulated annealing 法がやや効率が良かった。simulated annealing ならば、3 次元の計算で、nonbonded 原子間相互作用を小さくして絡まりを避けた後、ゆっくりもとに戻す計算とも比べられる。これを従来法として比べるなら、やや勝る結果になった。	
4. まとめ 76 アミノ酸の大きさのタンパク質では、工夫した分の利点がさほど大きくない結果になっている。分子量が大きくなるに従って、3 次元では極端に原子間相互作用をスケールダウンしないといけないことが分かったが、計算は可能であった。	
5. 今後の計画・展望 さらに困難度の高い問題として、分子量が大きい場合、実験的構造情報が少ない場合、利点が拡大	