

課題名 (タイトル) :

glycoinformatics

利用者氏名 : 加藤雅樹

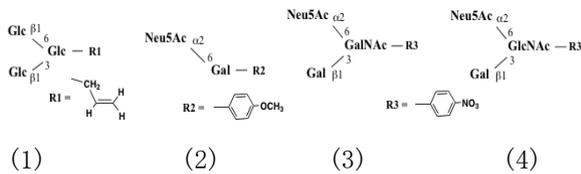
所属 : 糖鎖構造生物学研究チーム

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

タンパク質による糖鎖分子の認識機構の解明には、糖の水酸基や水分子との水素結合の理解が欠かせない。また、糖鎖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評価することが重要である。本研究では異性体の関係にあるモデル糖鎖を対象として、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

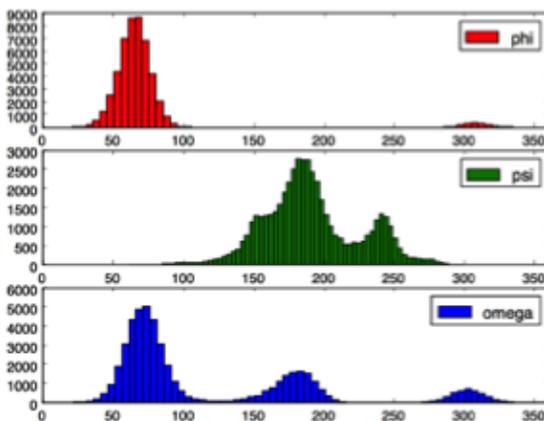
2. 具体的な利用内容、計算方法

モデル糖鎖として、以下の4つの糖鎖を対象として、力場 GLYCAMGlycan11 を使い amberAMBER で分子動力学計算を行った。

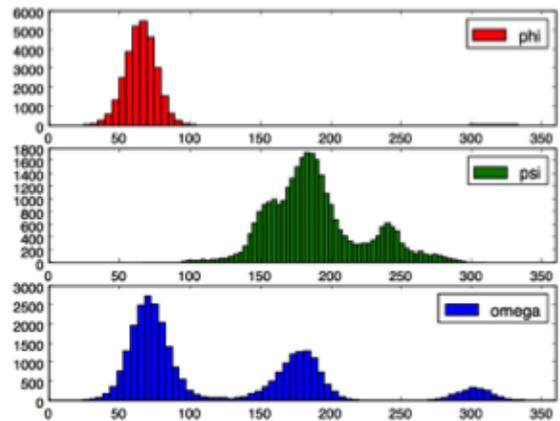


3. 結果

以下に (2) Neu5Ac α (2-6)Gal と (3) Neu5Ac α (2-6)[Gal β (1-3)]Gal の α 2-6 結合のグリコシド結合まわりの二面角 φ、ψ、ω の分布を示す。  
(2)



(3)



(2)と(3)では、φ、ω角はほとんど分布に違いが認められなかった変化がない。しかしながら、φ角では2糖と3糖では trans-gauche に対応する角度 (を示す 150 から 240 度) を示している部分の分布存在確率においてがわずかな違いが見られた。

4. まとめ

MD 計算の結果より (2) と (3) の 2 糖、3 糖の結果よりダイナミクスはほとんど大きな違い変化はないことが明らかになった。一方 φ については、NMR 測定によって得られたスピン結合定数 ( $^3J_{H,H}$ ,  $^3J_{C,H}$ ) の結果ではより、(2) と (3) の φ の trans-gauche に対応する角度を示す (150 から 240 度) を示している部分の分布が多少異なっていることが示唆された。全く異なるアプローチ (NMR, MD 計算) で同様の傾向が観測された。

5. 今後の計画・展望

今回の計算では現時点では、NMR の観測の結果とから多少の違いについては MD 計算の結果からではより確かな根拠にするのは難しいは完全には一致しない。今後はサンプリングの手法を精査する予定である。さらに、他の糖鎖についても NMR と MD 計算を用いて立体構造の変化とダイナミクスについて研究を進める予定である。

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

鷗沢洵、加藤雅樹、山口芳樹、榊飛雄真

NMR と分子力場計算を併用した糖鎖の立体構造とダイナミクスに関する研究

第 5 4 回 NMR 討論会、2015/11/8 千葉工業大学津田沼キャンパス