

提出日：平成 28 年 5 月 20 日

平成 27 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

(2) 研究成果の概要

課題名	固体 NMR と分子動力学法を組み合わせた立体構造解析		
研究代表者	氏名	亀田倫史	
	所属機関名・部局名	産業技術総合研究所 創薬基盤研究部門	
	職名	主任研究員	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	国際共同研究課題	
	<input type="radio"/>	超高磁場 NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	藤原敏道		
<p>SH3 ドメインを固体 NMR で測定し、得られた実測データを元に、化学シフトデータを予測した。予測データに基づき、蛋白質立体構造予測プログラム CS-rosetta を実行し、10000 構造発生させ、それらの構造に対して予測順位を付けたところ、予測順位 1~5 位の立体構造中に、実験で決定された立体構造と非常によく似たものが含まれることが分かった。また、ユビキチンについても同様の手順で予測を行ったところ、同様の結果が得られている。</p> <p>また、そこで、DARR などの一般的な固体 NMR 測定、常磁性を持つイオン Mn²⁺ を、蛋白質上に付加したタグに結合させ PRE 測定、CS-rosetta による計算を組み合わせた立体構造決定法を検討したところ、ProtenG の立体構造を、X 線結晶解析による立体構造との RMSD が 1.5 Å 程度で決定できることを示した。本内容は J Biomol NMR に投稿し、受理された。</p>			

※本様式は、“拠点事業成果報告”として、拠点ホームページにて公開させていただく予定です。

※必ず A4 用紙 1 枚におさめて下さい。 ※提出期限：平成 28 年 5 月 20 日（金） ※提出の際は PDF 変換して下さい。

※提出先：大阪大学蛋白質研究所拠点プロジェクト班 E-mail: tanpakuken-kyoten@office.osaka-u.ac.jp