

(様式 1-2)

提出日：2020 年 月 日

2019 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・人工知能研究センター	
	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"/>	超高磁場 NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	藤原敏道		
<p>本年度は昨年度に引き続き、アミロイドの安定性を MD シミュレーションにより調査した。推定されたアミロイドの立体構造を高温（500K 以上）で MD シミュレーションを行い、破壊されるまでにかかった時間で安定性を見積もった。</p> <p>また、本年度から、電子顕微鏡（阪大所蔵）による測定で得られた回析像に対する fitting も構造決定に取り入れた。なぜなら、固体 NMR は、シグナルが弱いために、化学シフトなどのシグナルに対するアミノ酸の割り当てが難しく、特に繊維中では、同種のアミノ酸が近接するために、アミノ酸の割り当てはさらに困難であり、推定した立体構造が正しいか判断するのが難しいためである。この 2 つの測定法の組み合わせによって推定された立体構造候補群に対して、シミュレーションを行った。昨年度に比べて、立体構造が破壊されるまでの時間が、かなり延びてきていることから、立体構造の精度が増していることが推測された。</p> <p>また、MD シミュレーションを用いて、蛋白質変異体群の熱安定性（変性温度 <math>T_m</math>）を予測する手法を、4 蛋白質の様々な変異体群（アミノ酸変異、ループ挿入変異など）に適用しても高精度で予測できることを示し（相関：0.7~0.9）近日中に論文投稿する予定である。</p>			

