

提出日：平成 29 年 5 月 15 日

平成 28 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	膜タンパク質イオンチャネル構造の固体 NMR 解析		
研究代表者	氏名	出村 誠	
	所属機関名・部局名	北海道大学・大学院先端生命科学研究院	
	職名	教授	
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>膜タンパク質 ナトリウムポンプ型ロドプシン(NaR)の構造・機能解析と、その過程で発見された課題について、それを克服するためのデータ測定・解析手法の開発を並行しておこなった。</p> <p>NaR の構造・機能解析は、平成 27 年度から三次元スペクトルの測定、主鎖原子帰属を進めてきた。現在までに約 60 残基帰属することに成功している。また、Na<sup>+</sup>イオンの有無により主鎖構造や運動性が変化することを示唆するデータが得られた。</p> <p>帰属をより円滑に行うために、信号分離のよいパルスプログラムを導入した。しかし、測定感度の低さが問題になったため、圧縮センシングの導入によって単位時間あたりの感度が改善されるか検討した。通常測定で得られた三次元スペクトルデータをさまざまな割合でランダムに間引き、データのスパースさの指標である L1 ノルムを最小化するよう信号補間するアルゴリズム NESTA により欠損値を復元し、元データと比較した。その結果、70%程度データを削減可能であることが確認された。つまり、圧縮センシングにより 3 倍速での測定が可能であり、単位時間あたりの感度が向上することが示された。</p> <p>また、人手による帰属作業が限界を向えつつあったため、共分散 NMR 法による解消を試みた。スペクトル間の共分散計算は通常法での帰属候補探索と同等の意味をもつため、人手を必要としない網羅的な探索が可能となるメリットがある。反面、固体 NMR での帰属に使用する三次元スペクトルデータに共分散処理を施すと六次元空間にデータが展開されるため、計算量やデータ記憶容量が膨大となるデメリットが存在する。そこで、モンテカルロ積分に基づく高次元共分散処理法を開発した。モデルタンパク質 GB1 に本法を適用し、ノート PC 程度の計算機性能でも非常に高速に共分散計算できることを確認した。さらに得られたデータから主鎖を帰属することにも成功した。NaR の測定データにも適用し、通常の帰属手法と併用することで、解析効率が高まることも確認できた。</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 29 年 5 月 19 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