

提出日：平成 29 年 5 月 19 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	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>常磁性を持つイオンを蛋白質上に付加したタグに結合させ、様々な pH での PRE 測定を組み合わせた NMR 立体構造測定を行うことで、通常的手法に比べてより細密に立体構造を決定できることを明らかにした。</p> <p>以下、より詳細に述べると、常磁性を持つイオン Gd³⁺を蛋白質上に付加したタグに結合させ PRE 測定を pH6~8 で行った観測データを組み合わせた立体構造決定法を検討したところ、ユビキチンの立体構造を通常の PRE を用いた方法と比べ、より細密に決定できることを示した。また、Gd³⁺タグをポリグリシンに結合させた pH 滴定実験を行ったところ、タグの pKa が 7.0 付近にあるために、pH6~8 と狭い幅の変化にもかかわらず、タグの状態が大きく変化することがわかった。さらに pH=6,8 での MD シミュレーションにより、pH に応じてユビキチンの立体構造は変化せず、Gd³⁺タグの位置のみが変化することを示し、pH=6~8 での測定は、複数の異なるタグを用いた測定を行ったことに相当することを確認した。</p> <p>現在、本内容で論文を執筆中であり、近日中に投稿する予定である。本年度行った手法開発は溶液 NMR 測定と理論計算に基づいて行ったものであり、今後は固体 NMR 測定への応用を行っていく。</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