

(様式 1-2)

提出日：2021 年 5 月 14 日

2020 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		電位センサータンパク質群の動作機構の解明に向けた計算科学アプローチ	
研究代表者	氏名	鷹野 優	
	所属機関名・部局名	広島市立大学・大学院情報科学研究科	
	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		中川敦史 教授 (超分子構造解析学研究室)	
<p>昨年度に引き続き、主に(i)分子シミュレーション技術の開発に関して研究を進めた。蛋白質の二次構造の形成には水素結合が強く関わっている。二次構造中の水素結合エネルギーを定量的に見積もることは蛋白質の立体構造形成原理の理解に加え、分子力場の改良にも役立つ。昨年度は3_{10}ヘリックス ($3_{10}H$) およびπヘリックス (πH) の水素結合エネルギーを量子化学計算により調べたが、本年度は隣接残基の影響を調べるためにモデル毎に水素結合形成による電子密度変化を解析するとともに、αヘリックス (αH) の結果との比較を行った。また、3種類のヘリックスについて、各長さの Whole helical structure モデルにおける水素結合結合1つあたりのエネルギーの平均値を求めた。長さ0を除いて、ヘリックス長が大きくなるにつれて平均エネルギーが下がる傾向が見られた。これは水素結合の協同作用を示しているかもしれない。現在、解析結果の論文にまとめているところである。</p> <p>βシートやβターンにおける水素結合エネルギーの解析の準備も進めている。βシートについては、平行βシート (PB) と逆平行βシート (APB) の2種類について、それぞれ長さ1~5残基の2本鎖モデルを作成した。いずれもポリアラニンのN末端をアセチル基 (Ace) で、C末端をメチル基 (Nme) でキャップした分子 (Ace-Ala_n-Nme) である。モデル構造は二面角を固定し最適化を行った (PB : $\varphi = -119^\circ$, $\psi = 113^\circ$, APB : $\varphi = -139^\circ$, $\psi = 135^\circ$)。</p> <p>今後、βシートモデルについては、whole structure モデルに加えて minimal hydrogen bond モデルも作成し、negative fragmentation approach により水素結合エネルギーを評価する予定である。計算には、ヘリックスモデルの解析と同様に B97D/6-31+G(d)法を用いる予定であるが、他の計算手法についても検討する。分子力場 (Amber99SB) による水素結合エネルギーの計算も同様に行う。各二次構造の評価結果が揃った後に、さらに詳細な解析を行い、分子力場の改良について検討する予定である。</p>			