

# タンパク質複合体構造とダイナミックスの理論的研究

著者	長尾 秀実
著者別表示	Nagao Hidemi
雑誌名	平成19(2007)年度 科学研究費補助金 特定領域研究 研究実績の概要
巻	2007
ページ	1p.
発行年	2018-03-28
URL	<a href="http://doi.org/10.24517/00060164">http://doi.org/10.24517/00060164</a>



[◀ Back to previous page](#)

# タンパク質複合体構造とダイナミックスの理論的研究

Research Project

Project/Area Number	19029014
Research Category	Grant-in-Aid for Scientific Research on Priority Areas
Allocation Type	Single-year Grants
Review Section	Science and Engineering
Research Institution	Kanazawa University
Principal Investigator	長尾 秀実 Kanazawa University, 自然科学研究科, 教授 (30291892)
Project Period (FY)	2007
Project Status	Completed (Fiscal Year 2007)
Budget Amount *help	¥1,900,000 (Direct Cost: ¥1,900,000) Fiscal Year 2007: ¥1,900,000 (Direct Cost: ¥1,900,000)

All

**Keywords** シミュレーション / タンパク質 / タンパク質複合体 / 会合解離 / 振動モード / 活性部位 / 分子動力学法 / 電子状態

**Research Abstract** X線構造解析により知られている酸化型アズリン(Az\_<ox>)と還元型シトクロム(Cyt\_<red>)の立体構造を用いてAz\_<ox>-Cyt\_<red>複合体構造最適化をZDOCKプログラムパッケージおよび独自開発プログラムで予測した。Amber力場と活性部位付近の量子化学計算で見積もられた力場を用い、5854個のTIP5P水分子を加えた系を300K、NVTアンサンブル条件下でシミュレーションした。シミュレーションによりAz\_<ox>-Cyt\_<red>複合体安定構造を見いだした。ドッキングサイトは二つの部分に分けられ、いずれの部分もターン構造中にあり、水素結合で強く結合しAz\_<ox>-Cyt\_<red>複合体を形成していることがわかった。本研究により複合体に関わる水素結合部位が明確に示された。次にAz\_<ox>-Cyt\_<red>複合体ダイナミックスを考察した。会合前後でCyt\_<red>タンパク質振動が大きく変わっていることが見いだされた。またドッキングサイトではAz\_<ox>とCyt\_<red>との協調的振動モードが現れ、タンパク質構造変化のみならず、振動主成分変化が観測された。

還元型アズリン(Az\_<red>)は空气中酸素により酸化され結晶化が容易ではない。Az\_<red>-Cyt\_<ox>複合体構造決定もまた、空气中酸素による複合体酸化が起こるため現在のところ実験で決定するのは容易ではない。そこでAz\_<red>-Cyt\_<ox>複合体における各活性部位付近の電荷分布を用いた構造緩和シミュレーションを行った。Amber力場と活性部位付近の量子化学計算で見積もられた力場を用い、6204個のTIP5P水分子を加えた系を300K、NVTアンサンブル条件下でシミュレーションした。構造緩和後、複合体安定構造を見いだした。Az\_<red>-Cyt\_<ox>複合体ドッキングサイトはAz\_<ox>-Cyt\_<red>複合体のものとほぼ一致していることを見いだした。またDynamical Cross Correlation MapによりAz\_<red>のαヘリックスとCyt\_<ox>のほぼ全体が強く動的相関を持つことが見いだされた。一般にタンパク質ターン構造部分はB因子(RMSF)が最も大きく、次にαヘリックス部分が大い。本研究結果からターン構造部分にドッキング部位があり、AzとCytのドッキングによりターン構造部分の運動が束縛される。そしてαヘリックス部分へのエネルギー移動が示唆される。

## Report (1 results)

2007 Annual Research Report

## Research Products (4 results)

All 2008 2007

All Journal Article Presentation

[Journal Article] Geometrical Classification of Spagetti-like Nanoclusters	2008	▼
[Journal Article] Theoretical Study of Free Energy in Docking Stability of Azurin (II)-Cytochrome c551 (II) Complex System	2008	▼
[Journal Article] Aperture, symmetry, isotropy, and compactness analysis and their correlation in spaghetti-like nanostructure dynamics	2007	▼
[Presentation] Theoretical Studies on Docking Dynamics and Electronic Structure in Metalloprotein Complexes	2007	▼

URL: <https://kaken.nii.ac.jp/grant/KAKENHI-PROJECT-19029014/>

Published: 2007-03-31 Modified: 2018-03-28