

膜タンパク質の立体構造安定化に関する研究

大阪大学 情報科学研究科 田中涼, 二井手哲平, 戸谷吉博, 清水浩

目的 任意の膜タンパク質の構造安定性に影響するアミノ酸残基を網羅的に調査し、安定性を変化させ得るアミノ酸の位置や種類に関する情報を得る。

内容 タンパク質の全てのアミノ酸残基に対して、20種類全てのアミノ酸に置換した点変異モデルを網羅的に作製し、変異前後での自由エネルギー変化を評価した。

結果 作製した4,440の変異体モデルの内、1,037のモデルで構造が安定化することが示され、変異体作製のためのガイドマップが作成できた。

利用した計算機	OCTOPUS
ノード時間	2500時間
使用メモリ	3,800GB
並列化	20並列

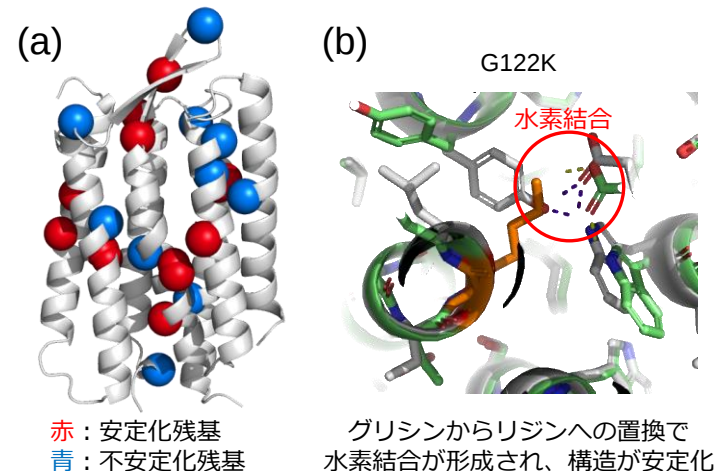


図 (a) 変異体作成ガイドマップ、(b) 構造安定化変異体のアミノ酸側鎖構造