

脂溶性リガンドと蛋白質との相互作用解析

ERATO 村田脂質活性構造プロジェクト、阪大院理 松岳大輔、松岡茂、村田道雄

[内容]

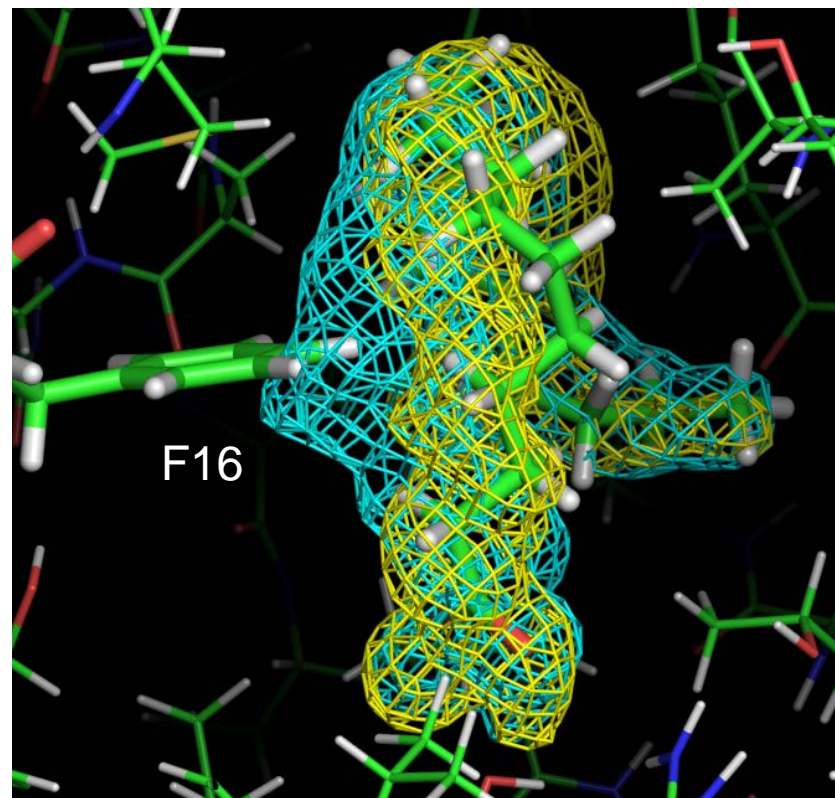
蛋白質と結合した脂溶性リガンドは、その大きな位置揺らぎにより、X線結晶構造解析によって、その構造やその相互作用を明確に同定することは困難である。本研究では脂肪酸を結合した脂肪酸結合蛋白質で分子動力学シミュレーションを行い、脂肪酸の相互作用形態の解明に取り組んでいる。

[計算]

計算にはPCクラスター16コアを用い、1構造あたり約1週間かけて、10 nsの計算を行った。

[結果]

脂肪酸が相互作用している蛋白質残基を同定し、その結果を踏まえて計算機内で変異を施した蛋白質で再度計算を行ったところ、結合している脂肪酸の構造に大きな変化がみられることを確認した(右図)。



結合している脂肪酸の分布密度比較
(黄メッシュ: wild typeでの分布,
シアンメッシュ: F16A 置換体での
脂肪酸の分布)