

受付 ID	16a-49
分野	生命

タンパク質間相互作用の粗視化モデルの開発

Development of a coarse-grained model for protein-protein interaction

川口 一朋

金沢大学理工研究域数物科学系

1. 研究目的

本研究では、タンパク質の自発的な複合体形成のメカニズムを明らかにするための新規粗視化モデル開発を目指す。そのために、2015年度に引き続き全原子分子力学シミュレーションを用いて水溶液中のアミノ酸側鎖間の相互作用を評価する。また、得られたモデルポテンシャルを用いてタンパク質複合体の粗視化シミュレーションを行い、モデルの妥当性を評価する。

2. 研究成果の内容

2016年度は特に電荷を持つアミノ酸を対象として粗視化モデルの開発を行ってきた。具体的には、正電荷を持つ Lys と負電荷を持つ Glu に対して、水溶液中のアミノ酸間に働く有効相互作用を全原子分子力学シミュレーションから求め、粗視化ポテンシャルを構築した。また、異種アミノ酸間の相互作用に対してポテンシャルパラメータの混合側が成立するかについて検討した。得られたモデルを用いて GCN4-pLI の四量体形成過程を明らかにした (図 1、論文準備中)。

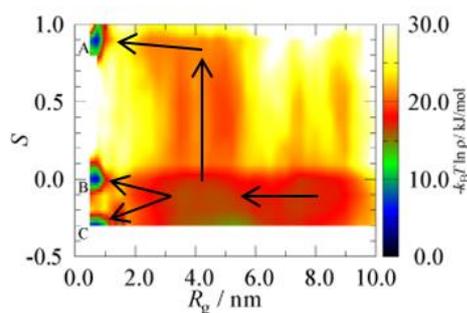


図 1: GCN4-pLI の会合の自由エネルギーランドスケープ

3. 学際共同利用として実施した意義

学際共同利用としてスーパーコンピュータを利用したことにより、多大な統計量を必要とする計算を効率的に実行することができた。

4. 今後の展望

他の種類のアミノ酸などに拡張して、タンパク質間相互作用の粗視化モデルポテンシャルを完成させ、大規模なタンパク質複合体の粗視化シミュレーションの発展を目指す。

5. 成果発表

(1) 学術論文

1. K. Kawaguchi, S. Nakagawa, S. Kinoshita, M. Wada, M. H. Saito, H. Nagao “A simple coarse-grained model for interacting protein complex” Mol. Phys. (2017) 115 587-597.

(2) 学会発表

1. K. Kawaguchi, H. Nagao, “Theoretical Study of a Coarse-grained Potential of Hydrophobic Interaction between Protein Molecules” (poster) International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016) Oct. 10-13, 2016, Nagoya, Japan.
2. K. Kawaguchi “Theoretical study of intermolecular interactions for protein systems” (Oral) International Workshop on Computational Science 2017, Feb. 15-16, 2017, Kanazawa, Japan.
3. K. Kawaguchi, S. Nakagawa, I. Kurniawan, K. Kodama, M. Wada, H. Nagao “Theoretical study of a coarse grained model of electrostatic interaction between protein molecules” (Poster) The 57th Sanibel Symposium, Feb. 19-24, 2017, St. Simons Island, USA.
4. 川口一朋、長尾秀実 “タンパク質間相互作用の粗視化モデルに関する理論的研究” (口頭) 第10回分子科学討論会 2016年9月13日～15日 神戸
5. 川口一朋、長尾秀実 “水溶液中のタンパク質間静電相互作用の粗視化モデル” (ポスター) 第30回分子シミュレーション討論会 2016年11月30日～12月2日 大阪
6. 川口一朋、中川聖、長尾秀実 “水溶液中のタンパク質間静電相互作用の粗視化モデル” (ポスター) 平成28年度生物物理学会中部支部講演会 2017年3月6日 名古屋

(3) その他

なし

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		