

# タンパク質立体構造予測に向けた粗視化モデル構築

松澤研 2000 年 博士前期課程修了 佐々木 尚(名大院・人情)

タンパク質の新しい粗視化モデルによって、シートを含むタンパク質の構造形成シミュレーションを行った結果について報告する。

近年の計算機能力の向上と計算法の進歩に伴って、全原子モデルを用いた構造予測(補 1)が行われるようになったが、全原子モデルによる計算は残基数が増大するにつれて著しく困難になる。そこで我々は、一つのアミノ酸残基を一つの粒子で表す粗視化によって、短い計算時間で構造予測を可能とするモデルを構築することを試みている。今まで我々が用いてきた粗視化モデルでは、ライブラリ蛋白(補 2)における構造の統計的出現頻度を反映させた経験的ポテンシャルを用いる事によって、ライブラリに含まれない標的タンパクとしてヘリックスのみからなるタンパク質を、広がった構造からネイティブ構造へフォールドさせる事が可能であった<sup>1)</sup>。我々は現在、この経験的ポテンシャルを改良する事により、

シートを含むタンパク質をネイティブ構造へフォールドさせる事に挑戦している。当日はこの改良によって得られた、protein G などのタンパク質についての構造形成シミュレーション結果を報告する。

1) M. Sasai, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **92**, p.8438, (1995).

(補 1) “構造予測”とは“タンパク質立体構造予測”を指す。タンパク質はアミノ酸が一次元的に繋がってできた生体高分子であり、生理条件下におくとそれは一つの決まった構造(ネイティブ構造)に巻き戻る(フォールドする)。すなわちアミノ酸配列が与えられればそのタンパク質のとり構造は決まる。近年、このアミノ酸配列情報のみからのタンパク質立体構造予測の問題が盛んに行われており、2年に一度、タンパク質立体構造予測コンテストが行われている。

(補 2) PDB(Protein Data Bank; <http://pdb.protein.osaka-u.ac.jp/pdb/index.html>)からタンパク質の構造データを取得する。