

# ドッキングと分子シミュレーションの連帯によるタンパク質複合体の高精度構造予測

著者	齋藤 大明
著者別表示	Saito Hiroaki
雑誌名	平成27(2015)年度 科学研究費補助金 新学術領域研究(研究領域提案型) 研究実績の概要
巻	2014-04-01 2016-03-31
ページ	2p.
発行年	2018-03-28
URL	<a href="http://doi.org/10.24517/00059914">http://doi.org/10.24517/00059914</a>



[◀ Back to previous page](#)

# ドッキングと分子シミュレーションの連帯によるタンパク質複合体の高精度構造予測

Publicly

<b>Project Area</b>	Chemical Biology using bioactive natural products as specific ligands: identification of molecular targets and regulation of bioactivi	All
<b>Project/Area Number</b>	26102722	
<b>Research Category</b>	Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas (Research in a proposed research area)	
<b>Allocation Type</b>	Single-year Grants	
<b>Review Section</b>	Science and Engineering	
<b>Research Institution</b>	Kanazawa University	
<b>Principal Investigator</b>	齋藤 大明 金沢大学, 数物科学系, 助教 (40506820)	
<b>Project Period (FY)</b>	2014-04-01 – 2016-03-31	
<b>Project Status</b>	Completed (Fiscal Year 2015)	
<b>Budget Amount *help</b>	<b>¥2,210,000 (Direct Cost: ¥1,700,000, Indirect Cost: ¥510,000)</b> Fiscal Year 2015: ¥1,040,000 (Direct Cost: ¥800,000, Indirect Cost: ¥240,000) Fiscal Year 2014: ¥1,170,000 (Direct Cost: ¥900,000, Indirect Cost: ¥270,000)	
<b>Keywords</b>	分子動力学法 / 分子ドッキング / 結合自由エネルギー / 分子ドッキング法 / 自由エネルギー計算	
<b>Outline of Annual Research Achievements</b>	<p>本申請研究はタンパク質-基質複合体の構造予測の精度向上を目的に、ドッキングシミュレーションと分子動力学 (MD) シミュレーションを連帯させた新しい計算手法を提案し、これを用い、結合ポケット内における基質の最安定配向の探索手法の開発を行い、計算プログラムの開発とテスト計算を行なう。さらに結合自由エネルギー解析からタンパク質結合サイトの同定と結合構造の同定を行なう。</p> <p>本研究ではリガンド-タンパク質モデルとしてEstrogen receptor (ER, PDB ID: 1WGR)を用いた。分子ドッキング計算はMD計算によって生成されたレセプターのアサンブル構造に対して行う。本研究ではレセプター分子誘導適合をモデルするために、ドッキングにより示された結合ポーズの構造最適化を行う。その後、最適化された結合構造に対しMM-GBSA法を用いてリガンド-レセプターの結合自由エネルギー (スコア値) を評価する。最後に、作成したリガンド分子配座に対して、結晶の基質座標をreferenceにした根平均自乗変位(RMSD)計算を行い、結果の正当性を評価する。本研究では1500個のレセプター構造に対して誘導適合分子ドッキング計算を行い、それらの結合ポーズに対するスコア値とRMSD計算を行った。</p> <p>ドッキングによって予測された全ての基質配座のスコア値 (結合自由エネルギー) をRMSD値に対してプロットした結果、RMSDの値が小さくなるに従って結合エネルギーが低くなる結果が得られ、開発した手法の有効性が示された。最も結合エネルギーが低かった時のリガンド分子の結合構造のRMSD値は ~ 0.9オングストローム程度であり、結晶で解かれた基質配座とほぼ一致する結果を示した。</p>	
<b>Research Progress Status</b>	27年度が最終年度であるため、記入しない。	
<b>Strategy for Future Research Activity</b>	27年度が最終年度であるため、記入しない。	

## Report (2 results)

2015 Annual Research Report

2014 Annual Research Report

## Research Products (39 results)

	All	2016	2015	2014
All	Journal Article	Presentation		
[Journal Article] Decomposition analysis of free energy profile for Hsp90-ADP association				2016
[Journal Article] 分子ドッキング法を用いたリガンド結合構造予測と分子認識				2015
[Journal Article] NAMDを用いたタンパク質の分子動力学法				2015
[Journal Article] A hybrid type approach with MD and DFT calculations for evaluation of redox potential of molecules				2015
[Journal Article] NAMDを用いた分子動力学				2015
[Journal Article] Analysis of Water Molecules around GTP in Hras-GTP Complex and GDP in Hras-GDP Complex by Molecular Dynamics Simulations,				2014
[Presentation] Compounds screening by ensemble docking method: an application to Estrogen receptor				2016
[Presentation] Hras-GTP / GDP 系での GTP/GDP 周辺における水素結合の動的性質の分子動力学法による研究				2016

[Presentation] In silico compound screening by ensemble-based docking: an application to Estrogen receptor	2016	▼
[Presentation] Theoretical study on effective interaction between protein molecules	2016	▼
[Presentation] Exploring an appropriate ligand-binding pose by ensemble-based docking	2015	▼
[Presentation] アンサンブル分子ドッキングによるリガンド分子配座探索	2015	▼
[Presentation] 誘導適合分子ドッキング法による基質-タンパク質の結合構造予測	2015	▼
[Presentation] 水溶液中の溶質粒子の親水性・疎水性に関する理論的研究	2015	▼
[Presentation] Goモデルを用いたプラスチックアニン-シトクロムfにおけるタンパク質間相互作用に関する理論的研究	2015	▼
[Presentation] 粗視化モデルによるミセルの形成に関する理論的研究	2015	▼
[Presentation] プラスチックアニンとシトクロムfの会合-解離過程における自由エネルギー地形に関する理論的研究	2015	▼
[Presentation] Hras-GTP / GDP 系でのGTP/GDP周辺における水分子の動きの分子動力学法による研究	2015	▼
[Presentation] Prediction of binding pose of estradiol to human estrogen receptor: identification of druggable pocket and ensemble-based docking	2015	▼
[Presentation] Role of water molecules for association of Hsp90 and ADP	2015	▼
[Presentation] Prediction of binding pose of estradiol to human estrogen receptor: identification of druggable pocket and ensemble-based docking	2015	▼
[Presentation] Computation of redox potential of molecules by energy representation method	2015	▼
[Presentation] Prediction of Solvation Free Energy of Proteins: Molecular Dynamics Simulation and QSPR Model Approach	2015	▼
[Presentation] Exploring an accurate ligand-binding pose: ensemble-based docking study	2015	▼
[Presentation] 水溶液中の Hras-GTP 複合体の溶媒水との水素結合の解析	2014	▼
[Presentation] 水溶液中の粒子間に働く力の粒子サイズ依存性	2014	▼
[Presentation] フレキシブルレセプターモデルを用いた分子ドッキング	2014	▼
[Presentation] Development of molecular docking method with flexible ligand/receptor model	2014	▼
[Presentation] Thermal Stability of Gramicidin A in Lipid Bilayer: A Free Energy Analysis	2014	▼
[Presentation] Molecular docking study of structure and binding energy of ligand-protein complex in dissociation process	2014	▼
[Presentation] Theoretical study of distribution of ADP in binding pocket of Hsp90	2014	▼
[Presentation] フレキシブルモデルを用いた分子ドッキング法の開発	2014	▼
[Presentation] Comparative Studies in Prediction Solvation Free Energy in Octanol of Organic Compounds	2014	▼
[Presentation] MD法とQM/MM計算によるブルー銅タンパク質の酸化還元電位に関する理論的研究	2014	▼
[Presentation] 胃内部脂質二重層膜の構造安定性に関する理論的研究	2014	▼
[Presentation] 分子動力学法による多層ラメラ脂質二重層膜の安定性に関する研究	2014	▼
[Presentation] タンパク質間の解離過程における自由エネルギー地形に関する理論的研究	2014	▼
[Presentation] Hras-GTP の GTP 周辺での溶媒水と複合体の水素結合の分子動力学法による研究	2014	▼
[Presentation] Molecular docking study of protein-ligand system	2014	▼

URL: