

# タンパク質複合体の構造安定性とダイナミクスに関する理論的研究

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2021-01-25 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: Nagao, Hidemi メールアドレス: 所属:
URL	<a href="https://doi.org/10.24517/00060141">https://doi.org/10.24517/00060141</a>

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



[◀ Back to previous page](#)

# タンパク質複合体の構造安定性とダイナミクスに関する理論的研究

Research Project

<b>Project/Area Number</b>	20038018
<b>Research Category</b>	Grant-in-Aid for Scientific Research on Priority Areas
<b>Allocation Type</b>	Single-year Grants
<b>Review Section</b>	Science and Engineering
<b>Research Institution</b>	Kanazawa University
<b>Principal Investigator</b>	<b>長尾 秀実</b> Kanazawa University, 数物科学系, 教授 (30291892)
<b>Project Period (FY)</b>	<b>2008 – 2009</b>
<b>Project Status</b>	Completed (Fiscal Year 2009)
<b>Budget Amount *help</b>	<b>¥2,300,000 (Direct Cost: ¥2,300,000)</b> Fiscal Year 2009: ¥1,000,000 (Direct Cost: ¥1,000,000) Fiscal Year 2008: ¥1,300,000 (Direct Cost: ¥1,300,000)

All 

**Keywords** シミュレーション / 自由エネルギー / タンパク質 / 複合体 / 電子移動 / 結合エネルギー / 構造安定性 / 溶媒和自由エネルギー / タンパク質複合体 / 会合解離 / 振動モード / 活性部位 / 分子動力学法 / 電子状態

**Research Abstract** X線構造解析により酸化型アズリン(Az)と還元型シトクロムc551(Cyt)の構造が知られている。各立体構造にプロトンを付加し、各活性部位付近の必要パラメータを各活性部位類似のクラスターモデルを用いて密度汎関数法(UB3LYP/6-31G<sup>++</sup>/ESP)により見積もった。これらの立体構造を用いてAz\_<ox>-Cyt\_<red>複合体構造最適化をZDOCKプログラムパッケージおよび独自開発プログラムで予測した。これらの座標データから3つの複合体モデルを作成した。(1)水素結合を含む静電相互作用エネルギーを最小にしたモデル。(2)疎水性相互作用エネルギーを最小にした構造。(3)活性部位の電荷分布をAz\_<red>-Cyt\_<ox>型にしたモデル。これら3通りのモデルによるタンパク質複合体の溶液内での安定性を溶媒和自由エネルギー計算に評価した。計算した構造エネルギーに溶媒和自由エネルギー、エントロピーを加えることで新しく定義したタンパク質の自由エネルギーの計算結果は活性部位の電荷分布をAz\_<red>-Cyt\_<ox>型にしたモデルが最も低い値を示した。結合自由エネルギーの評価には、複合体を形成する前のAz\_<ox>単体の構造とCyt\_<red>単体の構造における溶媒和エネルギー、構造エネルギー、エントロピーを評価し、タンパク質複合体の自由エネルギーとの差から評価した。Az\_<ox>, Cyt\_<red>単体と複合体の自由エネルギーの差は-107kcal/mol、構造エネルギーの差は-47kcal/mol、エントロピーの差は31kcal/molとなった。これらの結果から結合自由エネルギーの値は-123kcal/molであることが示され、タンパク質複合体の結合自由エネルギーには溶媒和自由エネルギーが大きく寄与していることがこれらの計算結果から示された。

## Report (2 results)

2009 Annual Research Report

2008 Annual Research Report

## Research Products (8 results)

All 2009 2008

All Journal Article Presentation

[Journal Article] In silico and in vitro Approaches to Elucidate the Thermal Stability of Human UDP-glucuronosyltransferase(UGT)1A9	2009	▼
[Journal Article] Effects of Salty Water and Temperature on Shape Fluctuations of a Few Correlated Phospholipids	2009	▼
[Journal Article] Fuzzy Cluster Modes in Micellar Dynamics	2009	▼
[Journal Article] Effects of Salty Water and Temperature on Shape Fluctuations of a Few Correlated Phospholipids	2009	▼
[Journal Article] Theoretical Study of Free Energy in Docking Stability of Azurin(II)-Cytochrome c551(II)Complex System	2008	▼
[Journal Article] Free Energy Calculation of Docking Structure of Azurin(I)-Cytochrome c551(III)Complex Systems by using The Energy Representation	2008	▼
[Presentation] タイプI銅タンパク質の酸化還元電位に関する理論的研究	2009	▼
[Presentation] Structural Stability and Dynamics of Complex of Azurin and Cytochrome by Molecular Dynamics Simulation	2008	▼

