

タンパク質の原子レベルでのストレステンソル解析

Title: Atomic stress tensor analysis of protein

石倉孝一、波多野達朗、倭剛久

Takakazu Ishikura, Tatsuro Hatano and Takahisa Yamato

名古屋大学大学院理学研究科

Graduate School of Science, Nagoya University, Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, Aichi
464-8602

Frauenfelder らはミオグロビンのヘム鉄から CO 分子の解離によって引き起こされる協同的構造変化を説明するために、1985 年に“タンパク質震”モデルを提唱した。これは、タンパク質の特定の局所的な微小構造変化がトリガーとなり、段階的な反応プロセスを経て、機能発現に関連する構造変化を生ずるという考え方である。このモデルを直接的に表現する基本的な力学量としてストレステンソルが考えられるが、技術的な困難さのため、実際のタンパク質震タンパク質の解析には適用されることは希有であった。

我々は 2008 年、原子レベルでのストレステンソル解析を用いて、発色団の光異性化をトリガーとする局所的なストレスが光サイクル反応の間にどのようにタンパク質内を伝搬するのかを解析した[1]。また、強結合ホスト-ゲスト系に対するストレステンソル解析が Gilson によって行われた[2]。しかし、これらの解析には力場関数の多体ポテンシャル項が計算に入っていないため不完全なものである。

本研究では、力場関数の全項を考慮したストレステンソルを計算する表式を導出した。そして、ストレステンソルを計算するためのプログラムを開発した。このプログラムは分子動力学計算パッケージとは独立になっており、分子動力学パッケージの力場パラメータとトラジェクトリを読み込んでストレステンソルを計算することが出来る。

テスト計算では Ala3(ALA-ALA-ALA)に対してストレステンソル解析を行った。結果の一つとして、多体項を含む共有結合ポテンシャル(bond、angle、torsion、improper torsion)からのストレスへの寄与を計算したところ、多体ポテンシャル項からの寄与が大きいことが分かった。これは、タンパク質のストレステンソル解析を行う際には、これまで考慮されていなかった共有結合ポテンシャル項を含めて計算する必要があることを意味する。発表では、いくつかの系にこの手法を応用した具体例を紹介する。

[1] K. Koike, K. Kawaguchi, and T. Yamato, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 1400 (2008).

[2] M.K. Gilson, *J. Chem. Theo. Comput.* **6**, 637 (2010).