

物理量の流れを通して見たタンパク質の分子機能

Title: Protein functions and flow of physical quantities

倭剛久

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

タンパク質の状態の記述として（１）第一原理計算、（２）古典力場によるポテンシャル関数、（３）疎視化モデルの３つの階層が考えられ、マイクロからマクロなレベルへと至る。それぞれの階層は、電子状態計算と精密な動力学、ネイティブ状態の揺らぎ、折りたたみや巨大分子の運動を特に得意としている。我々は（２）の立場から（１）と（３）の方向を見据えてアプローチしている。

タンパク質のエネルギーの流れと allosteric network pathway[1-4]:

タンパク質分子がリガンドの結合や光照射の刺激に応答して構造変化を起こすメカニズムは重要な課題である。タンパク質の折りたたみ反応では、ネイティブ状態のアミノ酸間のコンタクトを用いた郷モデルが広く用いられている。我々は郷モデルを拡張し（倭郷モデル）、アミノ酸間のコミュニケーションにおいてもネイティブコンタクトの役割を重要視して、ヒトβ2アドレナリン受容体のアロステリック効果について研究した。

タンパク質電子移動反応：

タンパク質の電子移動反応に対するアミノ酸残基の貢献度を評価する方法[5]を活用し、青色光受容体ファミリーの電子移動反応経路を解析した。

タンパク質中のリガンド[6]／基質移動：

タンパク質中のリガンド移動の研究をさらにすすめるため、トリプトファン合成酵素の基質移動反応をアンブレラサンプリング法を用いて調べている。

References

- [1] T. Yamato, 4th France-Japan Joint Seminar, Imaging of spatiotemporal hierarchies in living cells – an overview of dynamics from molecules to cells –, Jan. 6-11, 2013, Hyogo, Japan.
- [2] T. Yamato, *Telluride Science Research Workshop*, Thermal transport at the nanoscale, Jun. 25-30, 2013, Telluride, CO, USA.
- [3] T. Yamato, Energy flow pathways in photoreceptor proteins, *Proteins: Energy, Heat and Signal Flow*, (2009) pp. 129-147, D. Leitner, J. Straub eds., Taylor and Francis.
- [4] T. Ishikura, T. Yamato, *Chem. Phys. Lett.*, 432, 533 (2006).
- [5] T. Kawatsu, *Peptide Science*, 100: 100-113, 2013.
- [6] T. Tsuduki, A. Tomita, S. Koshihara, S. Adachi, T. Yamato, “Ligand migration in myoglobin: A combined study of computer simulation and X-ray crystallography”, *J. Chem. Phys.*, 136: 165101 (9 pages) (2012).