

## 蛋白質の二次構造形成に関わる相互作用に関する計算化学的研究

### Computational study of molecular interactions in secondary structures of proteins

鷹野優、中村春木

Yu Takano and Haruki Nakamura

大阪大学蛋白質研究所

Institute for Protein Research, Suita Osaka 565-0879

蛋白質は、それぞれの特異な機能に適した三次元構造を形成している。 $\alpha$ ヘリックスや $\beta$ シートなどの二次構造は、そのような三次元構造を構成するために重要であり、二次構造の形成には水素結合などの相互作用が強く関わっている。このような相互作用を定量的に見積もることは蛋白質の三次元構造形成原理の理解を深めるのに加えて、蛋白質のふるまいを正確に記述する分子力場の開発にも役立つものである。本研究では、代表的な二次構造である $\alpha$ ヘリックスと平行 $\beta$ シート、反平行 $\beta$ シートの形成に関わる相互作用を、ポリアラニンからなるモデルペプチドを用いて、密度汎関数法 (B97D/6-31+G(d) [1])、分子力学法 (AMBER99-SB [2])により調べた。

$\alpha$ ヘリックスと $\beta$ シート形成に関わる水素結合の数と相互作用エネルギーとの関係を図に示す。 $\beta$ シートを形成する相互作用に関しては、分子力学法は密度汎関数法と同程度の結果を与えているものの、 $\alpha$ ヘリックスの形成に関しては、分子力学法は、密度汎関数法に比べて相互作用を過剰評価していることが明らかとなった。このことは、分子力場の改良の必要性を示唆している。

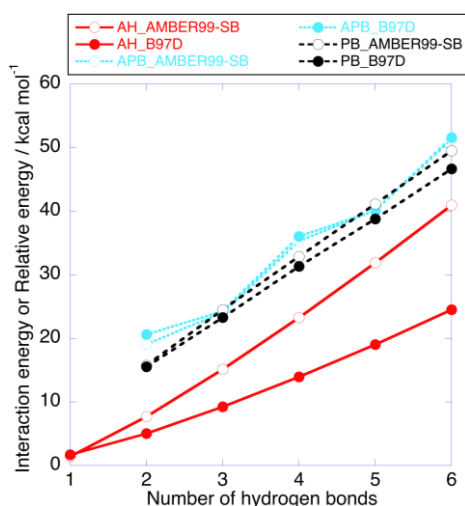


図.  $\alpha$ ヘリックスと $\beta$ シート形成に関わる水素結合の数と相互作用エネルギーとの関係

#### 【参考文献】

- [1] S. Grimme, S. Ehrlich, L. Goerigk, *J. Comput. Chem.* **32**, 1456 (2011).
- [2] J. Wang, P. Cieplak, P. A. Kollman, *J. Comput. Chem.* **21**, 1049 (2000).