

+N(中性子との連携解析)により拓がる研究世界
Research world pioneered by cooperative analysis with neutron

開催趣旨: 近年、構造生物学においてはさまざまな手法を組み合わせることで原子レベルの分解能を得るだけでなく、生体高分子における化学反応機序からドメインダイナミクスまで、サブナノからサブマイクロメートルスケールの構造・ピコからマイクロ秒に至る時間スケールの運動の解明が始まっている。本シンポジウムでは、このような「統合構造生物学」の流れの中に意外と知られていない中性子の散乱・回折技術を加えること(+N)で、更に見えてくる世界を概観し、+Nの将来の可能性を皆さんと議論したいと思っています。特に講演者の方にはこの分野で活発に活動している先生をお呼びし、最新の散乱回折技術と計算機を用いた統合的解析の実例を紹介して頂きます。

モデレーター: 杉山 正明 Masaaki Sugiyama
京都大学 Kyoto University

玉田 太郎 Taro Tamada
量子科学技術研究開発機構
National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

1. タイトル: MD シミュレーションと溶液散乱実験による蛋白質構造揺らぎの可視化: ベイズ学習の適用に向けて

荳口友隆 Tomotaka Oroguchi
慶応義塾大学 Keio University

蛋白質の機能発揮メカニズムを理解するためには、溶液環境における蛋白質の構造揺らぎを可視化することが重要である。私達はこれまで MD シミュレーションと、X線や中性子といった量子ビームによる溶液散乱実験を組み合わせることによって、蛋白質の構造揺らぎを可視化してきた(MD-SANXS法)。現在、複数ドメイン蛋白質や天然変性蛋白質など複雑な構造変化を行う蛋白質に関しても構造揺らぎを可視化できるように、ベイズ学習の枠組みを用いて MD-SANXS法を発展させているところであり、本発表ではそれらについて報告したい。

2. タイトル: 中性子線結晶構造解析と MD シミュレーションを駆使した酵素反応の理解

木下 誉富 Takayoshi Kinoshita
大阪府立大学 Osaka Prefecture University

X線結晶構造解析に加えて中性子線結晶構造解析を行うと、医薬品設計や酵素反応を理解するうえで重要な水素原子の位置をたやすく決定することができる。一方で、結晶構造解析は静止画像を見ており、酵素反応の神髄ともいえる分子の動きを理解することには向いていない。そこで、結晶構造解析に加えて MD シミュレーションを行うことで酵素反応機構をより正しく理解できるのではないかと考えた。本講演では我々が取り組んでいるエラスターゼについての研究を紹介する。

3. タイトル: 中性子準弾性散乱と分子シミュレーションによる蛋白質のドメイン運動の解析

中川 洋 Hiroshi Nakagawa
日本原子力研究開発機構

蛋白質のドメイン運動は、基質との相互作用メカニズムに重要であり、そのような蛋白質ダイナミクスの解析手法は基礎研究だけでなく創薬研究にも必須である。中性子準弾性散乱は分子ダイナミクスの解析に有効であり、この手法で得られる分子ダイナミクスの時空間スケールは分子シミュレーションと重なるため、両者の手法を融合した蛋白質ダイナミクスの解析は有効である。本講演では、中性子と分子シミュレーションを用いた蛋白質のドメイン運動の研究を紹介する。

Sponsored by

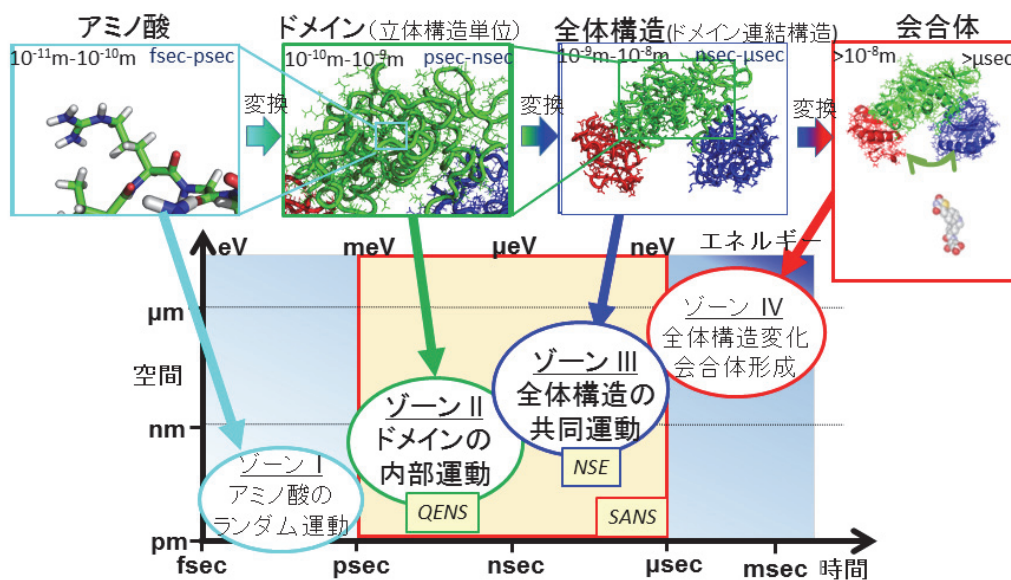


新世代中性子構造生物学研究会 Neutron Structural Biology for Next Generation

本研究会では、最新の中性子分光器を利用し、生命機能に直結した蛋白質の構造変化やダイナミクスの解明を主題とした「新世代の中性子構造生物学」の開拓を目指しています。そのために、「開発研究」と「実証研究」を軸に研究を進め、構造生物学の目標である「立体構造に基づく蛋白質機能の予測・改変」の実現に繋げることを考えております。

具体的には、開発研究では生命科学におけるミッシングゾーンであったメゾスケールの時空間領域（下図の白領域）での構造・ダイナミクスを解明するための新たな中性子計測技術を基軸に計算科学や関連する測定手法を統合した解析プロトコルを確立・標準化します。

また、実証研究では上記プロトコルを用いて「時空間階層性を持つ蛋白質の各階層の構造揺らぎや階層間の連携関係」を解析し、生理的条件下での無秩序な分子振動を分子集団の秩序的な共同運動に変換する機構の探求を行っています。



<http://www.rri.kyoto-u.ac.jp/NSBNG/home.html>