

# MD-SAXS法

## [技術の概要]

- マルチドメインタンパク質や天然変性タンパク質など、フレキシブルで結晶化しにくく、X線結晶構造解析が難しいタンパク質は数多く存在する。
- また、結晶構造と溶液構造が異なると想定される場合もある。
- そのような場合、低解像度ながら、溶液構造情報をX線小角散乱(SAXS)実験で得ることができる。
- そこで、バイオインフォマティクス技術を使ってモデリングした立体構造に対し、分子動力学(MD)シミュレーションとSAXS実験を連携させたMD-SAXS法を適用することにより、SAXS実験結果と一致した溶液構造モデルを得ることができる。

## [技術の利用例]

- 低分子結合などによって構造変化すると想定されるタンパク質があるが、片方の状態の構造しか分かっていない。
- 一方、SAXS実験にて、溶液構造が大きく異なることが示された。
- その場合、MD-SAXS法を用いることで、物理化学的に無理がなく、SAXS実験結果と一致した立体構造を得ることができ、それに基づき、構造変化メカニズムを推定することができる。

## 連絡先

[所属] 横浜市立大学生命医科学研究科

[名前] 池口満徳

[E-mail] ike@tsurumi.yokohama-cu.ac.jp