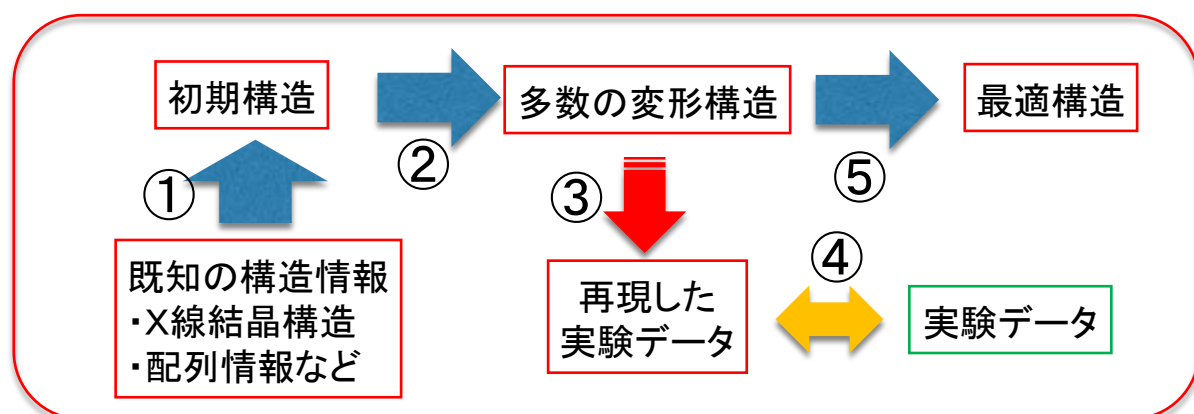


低解像度立体構造情報を再現する原子モデル構造構築技術

[技術の概要]

原子モデル構造構築の手順

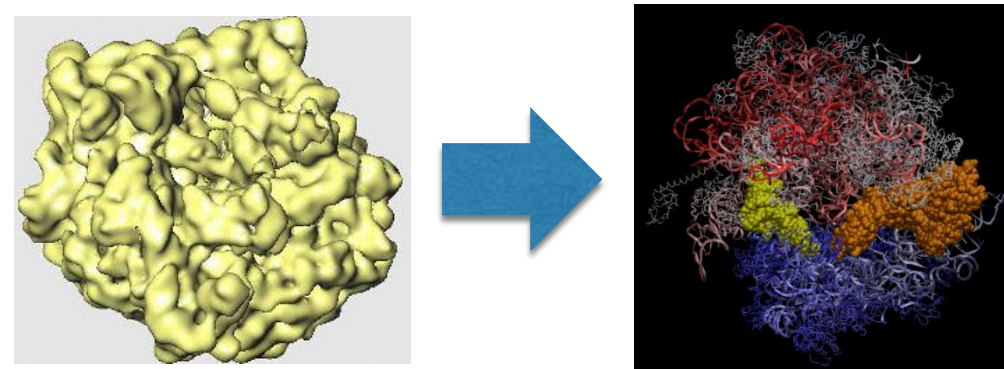


- ① 既知の構造情報をもとに、初期構造を構築します。
- ② 計算機手法を用いて、初期構造を変形し、多数の変形構造を構築します。
- ③ 各変形構造から実験データをシミュレートします。
- ④ 実験データとシミュレーション結果を比較します。
- ⑤ 実験データと最も類似度の高い変形構造を選びます。

支援に供する設備等

- ・計算機クラスター
- ・開発した計算機プログラム
- ・必要に応じてプログラム開発を行います。

[技術の利用例]



3D-EM構造(左)をもとに、蛋白質合成途中の70Sリボソームの原子モデル構造(右)を構築しました。3D-EM構造に含まれる70Sリボソーム、tRNAおよびEF-GそれぞれのX線結晶構造を変形し、3D-EM構造が再現されるように全体構造を構築しました。

連絡先

[所属] 日本原子力研究開発機構

[名前] 松本 淳

[E-mail] matsumoto.atsushi@jaea.go.jp