

X線小角散乱情報の相関解析

[技術の概要]

- X線小角散乱(SAXS)と他の構造情報を組み合わせて、拘束条件付き分子動力学計算を行うことにより、全ての入力情報を満足するタンパク質の立体構造を系統的かつ合理的に構築する。
- 特にSAXSとタンパク質の二次構造情報のみから、アミノ酸残基レベルの精度で立体構造を迅速かつ簡便に求めることができる。この際に必要な入力データは、実測SAXS曲線とアミノ酸残基毎の二次構造情報である。

提供するプログラム

SAXS_MD (Webサイトにて公開)

[技術の利用例]

- NMRにSAXSの束縛を加えることにより、NMR単独の場合よりも高精度の立体構造を構築した。
- 部分変性構造を有するタンパク質のSAXSデータと二次構造情報から、分子の立体構造アンサンブルを計算した。

連絡先

[所属] 東京薬科大学生命科学部

[名前] 小島正樹

[E-mail] mkojima@toyaku.ac.jp