

X線小角散乱から得られる構造の精密化

[技術の概要]

- X線小角散乱(SAXS)データからab initio計算により得られたビーズモデルに対し、グラフ理論のアルゴリズムを用いて、主鎖候補をトレースする。
- N末端からC末端までトレースできなかった場合は、最長トレース経路を出力する。

提供するプログラム

TraceBeads (Webサイトにて公開)

なおプログラムは、近接ビーズどうしを辺で結んでグラフを作成するMakeEdgeと、作成したグラフからハミルトン路を探索するHamilton-Pathから成る。

[技術の利用例]

- 同一の実測SAXSデータから、ab initio計算プログラムGASBORによりビーズモデルを多数構築し、各モデルに対してTraceBeadsを適用した。

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