

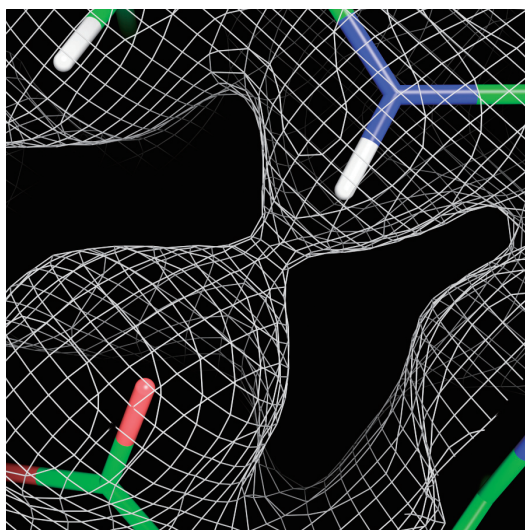
表紙の図について

「タンパク質のMEM電子密度」

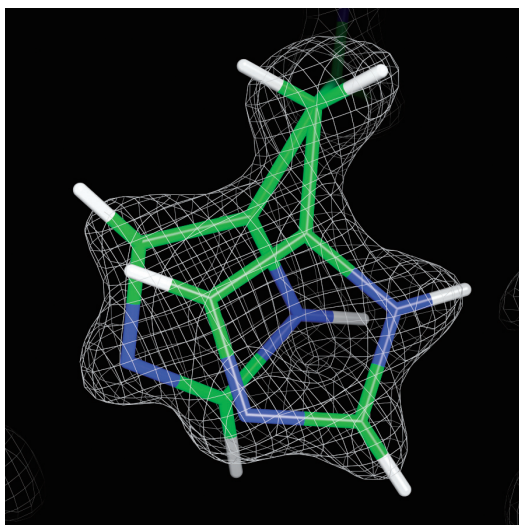
図はタンパク質Putative Acylphosphatase分子のマキシマumentロピー法（MEM）で求めた電子密度である。タンパク質分子はStickモデルで示しており、緑は炭素原子、赤は酸素原子、青は窒素原子、白は水素原子である。また水分子を赤色の球で示している。メッシュはMEM電子密度の等電子密度面を示している。

タンパク質は生体内で様々な機能を担う物質である。構造と機能の関係を調べるために、精密な構造解析が求められている。MEMは従来の方法より高精度の電子密度を計算できる方法である。MEMを用いたPutative Acylphosphataseの構造解析では、水の構造や、分子の動きを示すDisorder、水素結合まで明らかにすることができた。このような詳細な構造は、従来の構造解析では明らかにすることができなかった。タンパク質のMEM計算には膨大な計算が必要であるが、大規模計算機の利用により、MEMを用いた構造解析が行えるようになりつつある。今後の計算機性能の向上により、タンパク質のMEM解析から機能に関連した詳細な構造を明らかにできることが期待される。

(名古屋大学大学院工学研究科：中村高洋 青柳 忍 西堀英治 坂田 誠)



MEMにより観測された水素結合 (a)



マルチコンフォーマー (b)