

## MD 法による $\beta$ -1,3-グルカンの構造解析

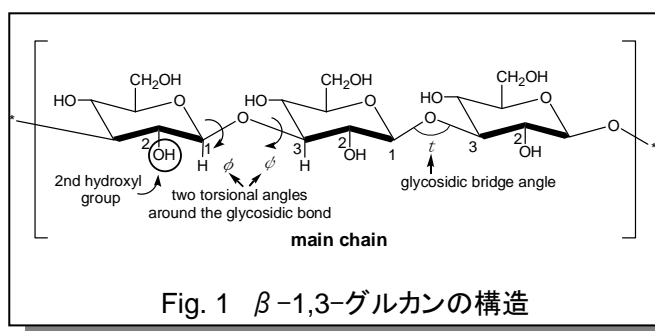
○大河平 紀司<sup>1</sup>、三好 賢太郎<sup>1</sup>、上江洲 一也<sup>1</sup>、櫻井 和朗<sup>1</sup>、新海 征治<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 北九州市立大学国際環境工学部(〒808-0135 福岡県北九州市ひびきの1番1号)

<sup>2</sup> 九州大学大学院工学研究院応用化学部門(〒808-0135 福岡県福岡市東区箱崎6-10-1)

### 【緒言】

$\beta$ -1,3-グルカンは Fig. 1 に示すような  $\beta$ -1,3 結合で連なったグルコース鎖が 3 本集まり 3 重螺旋構造をとる事が知られている。近年、我々はこの  $\beta$ -1,3-グルカン類の 3 重螺旋構造中の 1 つの鎖が核酸によって置き換わった複合体ができることを発見した。<sup>1)</sup> また、その複合体を MO 法で計算し、最適化構造および水素結合等の詳細を報告している<sup>2)</sup>。本研究の目的は、その複合体の分子構造を計算化学的手法により予測し、より詳細な挙動を調査することである。そのためには  $\beta$ -1,3-グルカンの水中における挙動の見解が必要であるため、 $\beta$ -1,3-グルカンである Curdlan と Schizophyllan の MD 計算を行った。



### 【方法】

Curdlan の 19 残基 3 重螺旋モデルを Deslandes らの X 線回折データ<sup>3)</sup>より再現し、Schizophyllan に関しては Curdlan の 3 残基に 1 つの側鎖を加えた。プレ計算として MM 法で構造最適化を行った。その後、水分子 (TIP-3P) 20000 個、NTP アンサンブル (1atm、298K) 環境下で MD 法を 700ps 行った。

### 【結果】

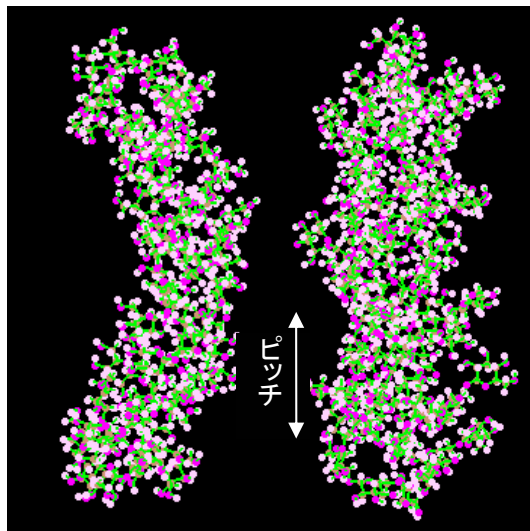


Fig.2 に 700ps 後の Curdlan と Schizophyllan のスナップショットを示す。 $\beta$ -1,3-グルカンの主鎖は水中において熱運動で伸縮していたが、時間の経過と共に両方のピッチ (螺旋 1 巻き分の長さ、6 残基分) の値は安定し、Curdlan、Schizophyllan の平均ピッチはそれぞれ、20.6 Å、18.8 Å であった。これら 2 つの構造の違いは側鎖の数であり、側鎖の付加によってピッチが抑制されていた。そこで、側鎖がどのような影響を与えているのかを調査した。さらに、700ps 後の Schizophyllan の構造を調査したところ、螺旋中心に約 3.2nm の空孔が存在していた。この原因についての考察も行った。

Fig. 2 700ps 後の Curdlan と Schizophyllan

### 参考文献

- 1) Sakurai, K.; Shinkai, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 4520-4521.
- 2) Miyoshi, K.; Uezu, K.; Sakurai, K.; Shinkai, S. *Biomacromolecules*, **2005**, 6, 1540-1546.
- 3) Deslandes, Y.; Marchessault, R. H.; Sarko, A. *Macromolecules*, **1980**, 13, 1466-1471.