

Molecular Dynamics Simulations of DNA-Free and DNA-Bound TAL EffectorsWan, H., Hu, J.P., Li, K.S., Tian, X.H., and Chang, S., *PLoS One*, 2013, Oct 10, e76045.

概要

dHax3 TALE の DNA-free form と DNA-bound form の結晶構造を初期構造として、MD シミュレーションを行った。平衡時における水素結合の存在率、TALE と DNA 原子間距離の解析の結果、結合に重要な残基を同定し、これまでの実験結果とよく一致した。

また、平衡時の座標情報を主成分分析した結果、open-close の運動が存在することがわかり、これが DNA 探索に重要であると考えられる。

一方で、TALE 結合時の DNA の構造解析の結果、5' 領域に特に構造変化が見られ、これは 5' 領域が結合に大きく寄与していることを示している。

References

1. Maisuradze, G.G., Liwo, A., and Scheraga, H.A. 2010. Relation between free energy landscapes of proteins and dynamics. *J. Chem. Theory Comput.* **6**: 583-595.
2. Lavery, R., Moakher, M., Maddocks, J.H., Petkeviciute, D., and Zakrzewska, K. 2009. Conformational analysis of nucleic acids revisited: Curves+. *Nucleic Acids Res.* **37**: 5917-5929.

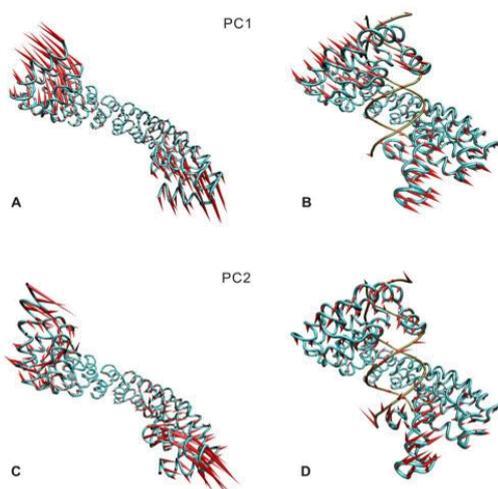


Figure 4. The first and second slowest motion modes of the DNA-free system (A and C) and DNA-bound system (B and D). The length of cone is positively-correlated with motive magnitude, and the orientation of cone indicates motive direction. The two systems have the similar slow motions. The first slowest motion mainly appears as the open-close movements between the two ends of the superhelical structure (A and B). The second slowest motion shows a twisting around each end (C and D).
doi:10.1371/journal.pone.0076045.g004

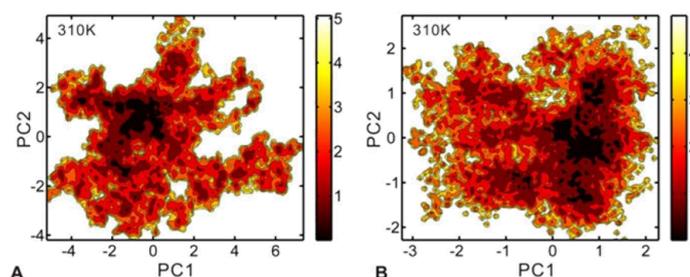


Figure 7. Free energy contour map versus the principal components PC1 and PC2 at 310 K in the DNA-free system (A) and DNA-bound system (B). Deeper color indicates lower energy.
doi:10.1371/journal.pone.0076045.g007