



計算科学による核内タンパク質天然変性状態の構造多型解析: 松下勝義, 菊池誠, 肥後順一

目的: 天然変性タンパク質の共役した折り畳みと結合のエネルギー地形を明らかにする手法を開発すること.

内容: 天然変性タンパク質 NRSF/RESTの疎視化模型に対してマルチカノニカルモンテカルロ法を適用し, エネルギー空間上のマルコフ状態模型を構成し, エネルギー地形の位相幾何的構造を明らかにする.

結果: 天然変性タンパク質の共役した折り畳みと結合の効果により, 折りたたみと結合の双方を包含したエネルギーファネルが形成される可能性を示した.

