

利用報告

天然変性蛋白質粗視化モデルのシミュレーション

大阪大学 サイバーメディアセンター 松下勝義、菊池誠

- 目的
 - 天然変性タンパク質NRSFの結合と折りたたみの共起における自由エネルギー地形の調査
- 内容
 - 天然変性タンパク質に対する、競合誘起天然変性の概念を提案し、それを満たす粗視化有効モデルをNRSFとターゲットタンパク質Sin3の全原子モデルの計算結果を基に構築し、自由エネルギー地形を計算した。
- 結果
 - 天然変性状態を再現することを確認した。
 - 自由エネルギー地形の計算から、天然変性タンパク質の結合と折りたたみの共起が引き起こされることが確認された。

