

リガンド結合が導く蛋白質の活性変化の MDシミュレーションによる予測

大阪大学 蛋白質研究所 土屋裕子、Gert-Jan Bekker、中村春木

目的 活性化リガンドの結合による二次構造変化が蛋白質活性を導く系において、異なるリガンド結合による蛋白質活性の変化を、シミュレーションによる二次構造の変化の度合いから推測する仕組みを構築する。

内容 活性化リガンド結合蛋白質の構造（活性化構造）を初期構造とし、活性化および非活性化リガンドを結合させた蛋白質の短時間シミュレーションを、温度や溶媒の有無など様々な条件下で実施した。着目する二次構造の崩壊の程度（ β シートを形成するストランド間の距離等）から、リガンドの蛋白質活性化能を区別する条件検討を行った。

結果 2016年度に実施した溶媒中でのシミュレーションにおいては、活性化および非活性化リガンドの蛋白質活性化能をそれぞれ正しく予測するシミュレーション実行条件が確定しつつある。今後はGBSAなどの非溶媒下での条件検討も実施する。

利用した計算機	VCC
ノード時間	約100ノード時間/run
使用メモリ	60GB
並列化	2並列

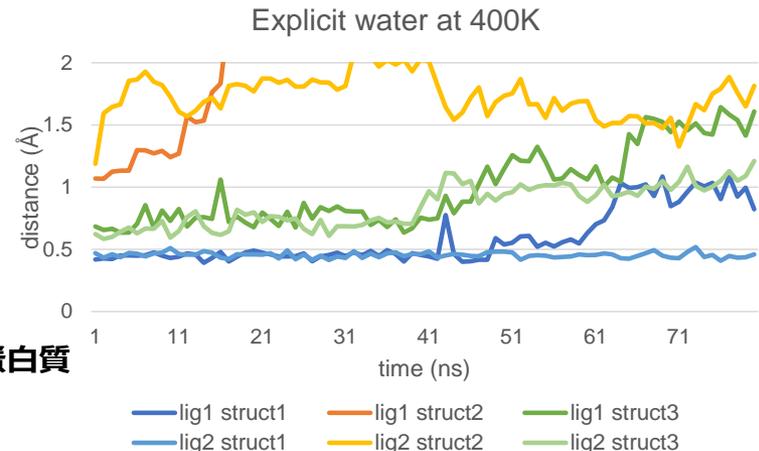


図 活性化/非活性化リガンド(lig1,2)結合蛋白質における二次構造(struct1-3)の崩壊の程度

縦軸：二次構造形成に重要な残基間の距離
横軸：シミュレーション時間