

効率的なタンパク質のリフォールディング 条件の探索

一般財団法人 高度情報科学研究機構 栄慶丈

目的 タンパク質のリフォールディングを行うための効率的な実験条件を決めるための指標として、分子シミュレーションによる解析を行った

内容 タンパク質のランダムコイル状態から変性剤の種類や濃度を変えた場合について、折りたたみ過程を追跡する分子シミュレーションを実行する

結果 特にモデルタンパク質Trp-cageのシミュレーションでは、折り畳みの速度や構造の安定性について溶媒環境の違いに差が見られ、実験で知られている二次構造の安定性の違いと傾向が一致した

利用した計算機
ノード時間
並列化

OCTOPUS
10,000時間
GPU, 24並列

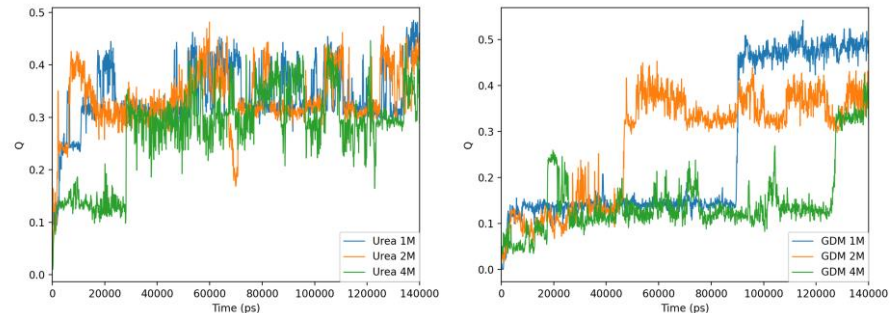


図 Trp-cageのシミュレーション中のネイティブコンタクトの変化。変性剤Urea（左）とGdmCl（右）の場合