

研究テーマタイトル:

MDシミュレーションを用いたキナーゼ変異の機構的理解

参加者（氏名・所属）

1. 信夫 愛・大阪大学WPI-PRIME
2. Yichao Wu・大阪大学WPI-PRIME
3. Mohamed Marzouk Sobaih・大阪大学WPI-PRIME

研究概要

EGFR、ABL、SRC、Alk などのプロテインキナーゼについて、構造・動態・阻害剤結合への変異の影響を調べるため、分子動力学（MD）シミュレーションを実施しています。アポ型と阻害剤結合同型、モノマーとダイマー、活性型と不活性型など複数の構造状態において変異を導入し、それらの違いが機能や疾患メカニズムとどのように関係するかを明らかにすることを目的としている。その第一段階として、Alkキナーゼドメインを対象に、GENESIS 2.1.4 を用いたベンチマーク計算をSQUIDスーパーコンピュータ上で実施し、異なるハードウェア構成に対する最適な実行条件を探索した。

Alk kinase+nanobody in solution
(75,670 atoms)

