

課題名 (タイトル) :

分子動力学シミュレーションによる Tom20 タンパク質のアミノ酸配列認識の理解

利用者氏名 :

宮下治\*

所属 :

\*計算科学研究機構 粒子系生物物理研究チーム

<p>1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係</p> <p>Tom20 はミトコンドリアタンパク質の輸送に関わるタンパク質である。Tom20 が輸送すべきアミノ酸配列をどのように認識しているかを理解するために、分子動力学シミュレーションを行い実験データと比較することで、運動と構造に関する詳細な情報を得る事を目的としている。本課題では、簡易利用によりシミュレーションのテストパフォーマンスなどの情報収集を行った。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>ACSG にインストールされている生体分子動力学シミュレーションプログラム NAMD を用いて Tom20 タンパク質に認識される presequence 上のアミノ酸残基の変異がどのように複合体の安定性や運動に影響するかのテストシミュレーションを行った。</p> <p>3. 結果</p> <p>テスト計算よりシミュレーションを問題なく行うことができる事が確認できた。</p> <p>4. 今後の計画・展望</p> <p>今後結晶状態の計算結果と実験データとの比較を行い、</p>	<p>詳細な運動情報を得ることを目指す。</p>
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------