

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*

理研での所属研究室名 :

*計算科学研究機構 粒子系生物物理研究チーム

-
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

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 が輸送すべきタンパク質を認識するためにプレ配列のアミノ酸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と実験データと比較することで、運動と構造に関する情報を得るための研究を行なっている。これまで、プレ配列のアミノ酸の種類が、どのように Tom20 と配列の相互作用に影響するかを明らかにしてきた。

2. 今後の計画・展望

新しく得られた結晶構造などの実験データとシミュレーションのデータとの比較を行っていく。

3. 利用がなかった場合の理由

本年度は他の計算機を利用することができたため、簡易利用での計算を行わなかった。