

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

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う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

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 タンパク質とそれに認識される presequence の複合体のテストシミュレーションを行い、計算時間などに関する情報を収集した。

3. 結果

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を確認し、必要になる計算時間などを見積もった。

4. 今後の計画・展望

今後、アミノ酸配列の異なる presequence や異なった Tom20/presequence リンカーの構造について計算を行ない、配列の違いがどのように運動や結合認識に影響するかを調べる。また、結晶状態の計算結果と実験データとの比較を行い、詳細な運動情報を得ることを目

指す。