

# $\beta$ ヘアピンペプチド・シニヨリンの折りたたみ過程の分子動力学シミュレーション

■末永敦他(理研GSC・高速分子シミュレーション研究チーム、suenaga@gsc.riken.jp)

## ■概要

□タンパク質は固有の立体構造を持ち、その構造は機能発現に重要である。タンパク質は自発的に折れたたみ、立体構造を形成するが、その折たたみ過程については生命科学においていまだ解明されていない謎である。本研究は、最も簡素なタンパク質モデルである $\beta$ ヘアピンを形成するシニヨリンというペプチドの折りたたみ過程を分子動力学法を用いてシミュレーションした。

## ■アルゴリズム

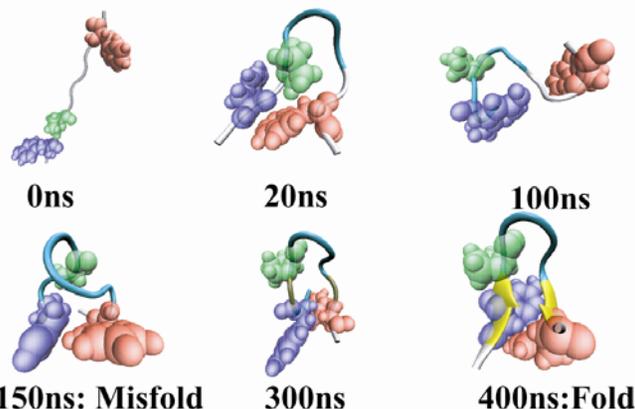
□分子動力学シミュレーション(Amber 8)

## ■計算規模

□MDGRAPE-3 PCI-Xで約1.5ヶ月の計算

□4,000~10,000粒子の系で、100,000,000~500,000,000ステップのシミュレーション

## Folding



## ■どんなことが期待されるか？

- タンパク質の立体構造形成機構の解明
- 人工タンパク質の分子設計
- タンパク質の構造と機能の関連性の解明