

Sup35の凝集過程の 分子動力学シミュレーション

■ 沖本憲明他(理研GSC・高速分子シミュレーション研究チーム、okimoto@gsc.riken.jp)

■ 概要

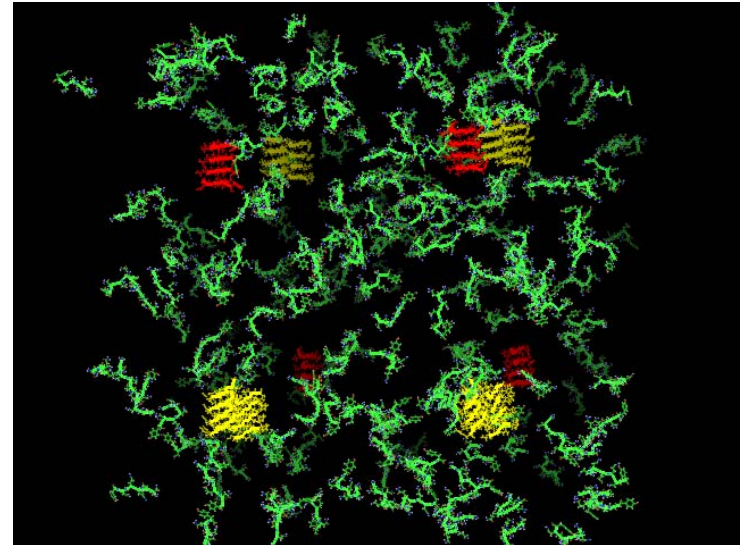
- タンパク質の凝集によって起こるアミロイド繊維は、プリオン病やアルツハイマー病の原因であると考えられている。しかしながら、この病原性のアミロイド形成の機構は明らかになっていない。
- 現在、分子動力学シミュレーションによってSup35由来のペプチドの凝集の機構を解明することを試みている。Sup35はイースト菌内にあるタンパク質で、アミロイド繊維を形成することが知られている。
- 現在までの結果で、Sup35由来のペプチドは、他の凝集しないペプチドに比べ、 β シートを形成する性質が強いことがわかってきた。今後、更なるシミュレーションによりSup35のアミロイド形成の詳細な機構を明らかにしたい。

■ アルゴリズム

- 分子動力学シミュレーション(MOA)

■ 計算規模

- 300テラフロップスMDGRAPE-3で1日の計算
- 水を含めて78万原子の系で、1ナノ秒のシミュレーション



■ どのようなことが期待されるか？

- アミロイド繊維の形成過程の解明
- アルツハイマー・プリオン・パーキンソン病などの疾病の機構解明
- 遺伝子多型と疾病との関係解明
- 疾病に対する治療法・薬剤開発