

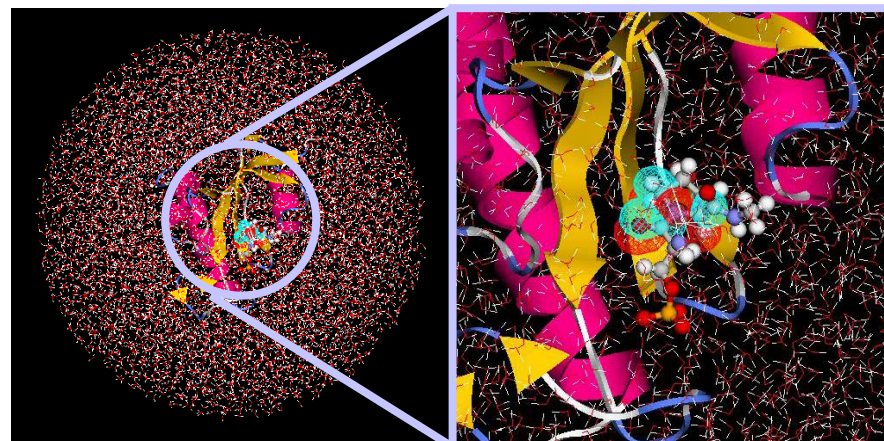
# プロリン異性化酵素Pin-1の QM/MM連成計算

## ■ 開発者

- 米澤 康滋 (大阪大学蛋白質研究所)
- 中田 一人 (NECソフト)
- 高田 俊和 (NEC基礎環境研究所)
- 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所)

## ■ 概要

- プロリン *cis-trans* 異性化酵素 Pin-1のQM/MM連成・分子動力学シミュレーション。プロリンを含む基質分子の分子軌道とその分子骨格及びリボン表示で表したPin-1タンパク質の動きを示す(AMOSS/myPresto)。



## ■ アルゴリズム

- 基質分子のプロリンを含む部分を、非経験的分子軌道法(Hartree-Fock: MINI4)による量子力学計算
- 残りの部分は古典力学を用いてAMBER力場で計算
- 孤立系での等温アンサンブル・シミュレーション (300 K)

## ■ 計算規模

- 総原子数 22,461原子
- 水(TIP3Pモデル) 6,878 分子
- PCクラスター16ノードで並列計算
- 全体で 2.5 ps の映像 (0.12 ps/秒)

## ■ どんなことが期待されるか？

- Pin-1プロリン異性化酵素は、細胞周期に関わる諸因子のリン酸化Ser/Thr-Pro部位の*cis-trans*異性化を特異的に促進することで、その活性及び細胞周期そのものを調整している。Pin-1は癌や神経変性疾患の発症を抑制していると考えられ、アルツハイマー病との関連も指摘されており、これら疾患に対する有望な分子ターゲットと見なされている。電子状態計算によってその活性機構を解析することで、酵素メカニズムの解明が期待される。