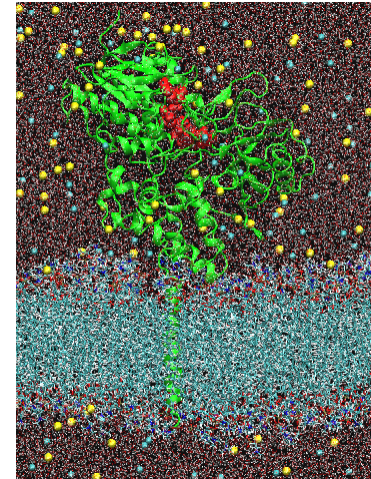


膜タンパク質モノアミン酸化酵素の 分子動力学計算



■ 開発者

- 米澤 康滋 (大阪大学蛋白質研究所)
- 菊川 豪太 (理化学研究所)
- 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所)

■ 概要

- 脂質二重膜を含む全原子モデルによる、膜タンパク質モノアミン酸化酵素MAO-Aの分子動力学シミュレーション (*myPresto*)

■ アルゴリズム

- 周期的境界条件による等温等圧(NPT)アンサンブル・シミュレーション (300 K, 1 atm)
- 水素原子は剛体モデルを利用し 2 fs/stepで稼動
- CHARMM力場を利用
- PME法による静電相互作用計算

■ 計算規模

- 総原子数 81,647原子 ($Cell = 70.1 \times 91.8 \times 122.6 \text{ \AA}^3$)
- POPC (*palmitoyl-oleoyl-phosphatidyl choline*)164分子
- 水 (TIP3Pモデル)17,125分子
- Na⁺イオン 76, Cl⁻イオン 78
- 全体で 20 ps の映像 (1ps/秒)

■ どんなことが期待されるか？

- モノアミン酸化酵素(MAO-A)はFADを補酵素として持ち、中枢神経系においてセトニン等の神経伝達物質を分解するミトコンドリア外膜結合タンパク質である。MAO-Aは、うつ病等の様々な神経症の治療薬の有望なターゲット分子であり、MAO-Aの基質／阻害剤認識機構を分子動力学シミュレーションで解析することで、関連する治療薬を開発するために重要な知見を与えることが期待される。