

アデニル酸キナーゼのClose状態から Open状態へのシミュレーション

■ 開発者

- 瀧上壮太郎、池口満徳、木寺詔紀（横浜市大）

■ 概要

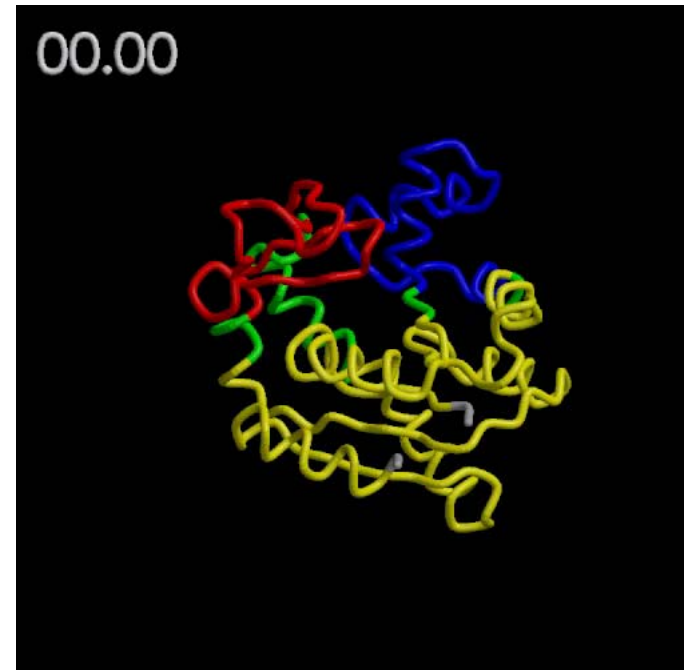
- アデニル酸キナーゼは、 $ATP+AMP \rightarrow 2ADP$ という反応を行うリン酸転移酵素である。結晶構造は、基質アナログ結合状態（Close状態）と非結合状態（Open状態）がある。これは、 $t=0ns$ でClose状態での基質アナログを水分子に置換して10nsかけてOpen状態に達する過程をシミュレートしている。

■ アルゴリズム

- プログラム: Marble（部分剛体法）
- 力場: CHARMM、TIP3P
- NPT
- PME

■ 計算規模

- 72,000 原子
- 10 ns



■ どんなことが期待されるか？

- 構造変化過程のダイナミクスを明らかにする
- close→openの過程を多数回シミュレーションすることによってpathの確率的振る舞いを明らかにすることができる