

Trp-Cageのフォールディング シミュレーション

■ 開発者

- 太田元規(東工大)、池口満徳、木寺詔紀(横浜市大)

■ 概要

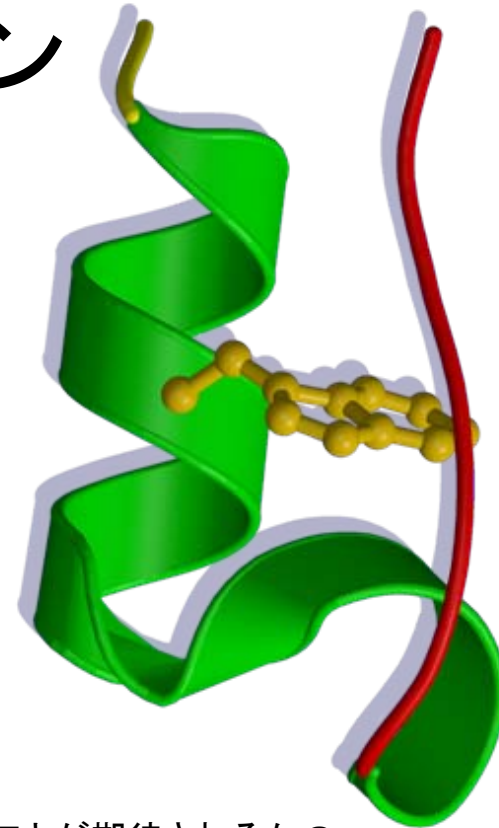
- Trp-Cageは20アミノ酸の人工ミニタンパク質であり、短時間で容易に一定の構造(NMRで決定されている)にフォールドする。ここでは、溶媒としてGBを用いてフォールディング過程をシミュレーションしている。このようなフォールディング過程を89軌道集めることによって、確率過程としてのフォールディングを捉えることができた。

■ アルゴリズム

- プログラム: AMBER
- カ場: 修正AMBER
- GB
- Grid Computing (TITECH GRID)

■ 計算規模

- 304 原子
- 50 ns



■ どんなことが期待されるか？

- 多数回のフルディングトラジェクトリの解析から確率過程としてのフォールディング過程の描像を明らかにした。
- GRID計算の強みを十分に生かし、大量の計算の実施が可能となった