

タンパク質フォールディング

■ 開発者

□ 神戸大学 高田彰二

■ 概要

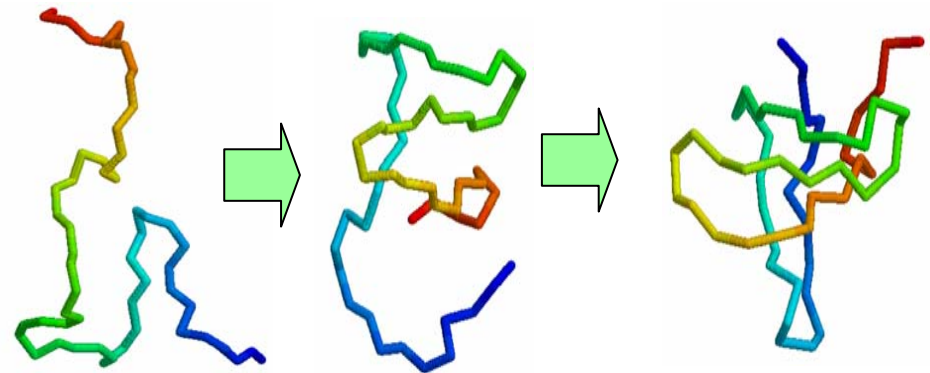
□ 実験構造情報をもとにした粗視化モデル、郷モデルを用いた、タンパク質のフォールディング過程の分子動力学シミュレーション。

■ アルゴリズム

- アミノ酸1個を球で近似した粗視化
- 郷モデル
- 温度一定条件でニュートンの運動方程式を積分

■ 計算規模

□ アミノ酸300残基程度までのタンパク質のフォールディング



■ どのようなことが期待されるか？

□ タンパク質フォールディング問題について、基礎的理解を得る