

生体分子機械のダイナミクス

■ 開発者

□ 神戸大学 高田彰二

■ 概要

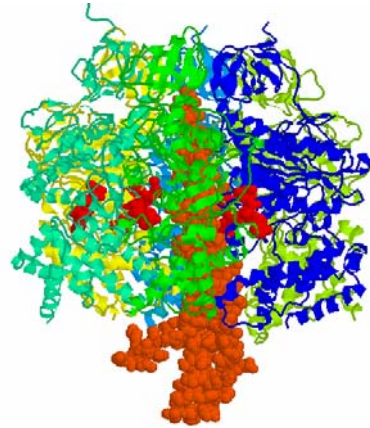
□ 実験構造情報をもとにした粗視化モデル、郷モデルを用いた、回転分子モーターF1-ATPaseの回転運動の分子動力学シミュレーション。

■ アルゴリズム

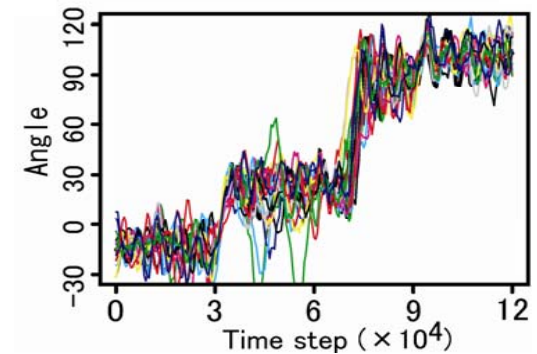
- アミノ酸1個を球で近似した粗視化
- 郷モデルとその拡張
- 温度一定条件でニュートンの運動方程式を積分

■ 計算規模

□ アミノ酸10000個程度のタンパク質複合体のミリ秒スケールの機能シミュレーション



シミュレーションによる
回転軸の角度の時間変化



■ どんないことが期待されるか？

□ 「たんぱく3000」などの生体分子の構造情報を直接利用して、細胞システムのダイナミズムをアミノ酸分解能で調べることが出来る。