

Azurin-Cytochrome-c₅₅₁複合体の ドッキングシミュレーション



■開発者の連絡先

長尾 秀実 (金沢大学院自然研)

■概要

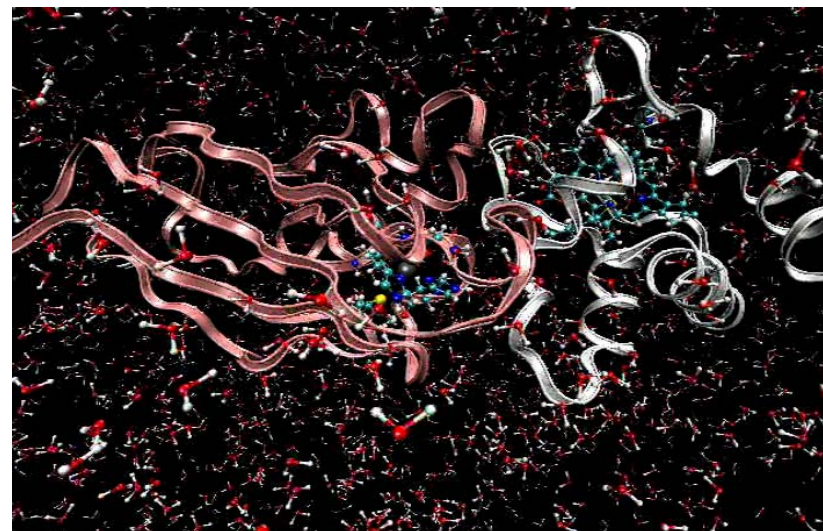
・実験的に観測困難な、電子伝達機能を有するタンパク質複合体構造である、Azurin-Cytochrome-c₅₅₁の構造予測とMDシミュレーション

■アルゴリズム

- ・電荷決定の為の量子化学計算
- ・静電気力と脱溶媒和エネルギー計算に基づく複合体構造予測プログラム
- ・分子動力学法

■計算規模

- ・並列計算機16台を約200時間使用したシミュレーション
- ・総原子数3216原子+水分子5854個
- ・シミュレーション総計算時間 3.0ns



■期待される事

- ・シミュレーションにより、実験では観測困難なタンパク質複合体の構造予測と、タンパク質間の機能発現のプロセスが解明できる。その結果、新薬開発の際の効率を飛躍的に上昇させることが出来ると予想される。