

受付ID	15a-35
分野	生命

生体分子粗視化シミュレーションプログラムの開発

Development of coarse grained simulation program for biomolecules

川口 一朋

金沢大学理工研究域

1. 研究目的

本課題研究ではタンパク質複合体の長時間のシミュレーションを効率的に実現するために、タンパク質間相互作用を取り入れたタンパク質粗視化モデルの構築を目指す。

2. 研究成果の内容

水溶液中の生体分子間に働く有効相互作用を調べるために、実在するタンパク質-基質系において、分子の重心間距離に対する自由エネルギープロフィールを求め、静電相互作用、VDW相互作用からの寄与を明らかにした。また、溶媒からの効果も明らかにした[1]。また、水溶液中の疎水性アミノ酸側鎖間に働く有効相互作用を全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションと自由エネルギー計算により求めた。得られた有効相互作用を静電相互作用およびVDW相互作用、また、アミノ酸間の直接相互作用および溶媒からの間接相互作用に分割し、それぞれの粗視化モデルポテンシャルの関数形およびパラメータを決定した。このポテンシャルを用いた粗視化シミュレーションにより、GCN4-pLC 四量体が疎水性相互作用によって会合することを明らかにした[投稿中]。

3. 学際共同利用として実施した意義

学際共同利用としてスーパーコンピュータを利用したことにより、多大な統計量を必要とする計算を効率的に実行することができた。

4. 今後の展望

分極を持つアミノ酸、電荷を持つアミノ酸などに拡張して、タンパク質間相互作用の粗視化モデルポテンシャルを完成させ、大規模なタンパク質複合体の粗視化シミュレーションを発展させる。

5. 成果発表

(1) 学術論文

1. K. Kawaguchi, H. Saito, and H. Nagao, “Decomposition analysis of free energy profile for Hsp90-ADP association”, Mol. Sim. (2016) DOI: 10.1080/08927022.2015.1102249 (in press) [査読有]

(2) 学会発表

1. Kazutomo Kawaguchi, Hiroaki Saito, Hidemi Nagao. Role of water molecules for association of Hsp90 and ADP. (ポスター) 第53回日本生物物理学会年会 2015年9月13日～15日 金沢
2. 川口一朋、齋藤大明、長尾秀実 水溶液中の溶質分子の親水性・疎水性に関する理論的研究 (口頭) 第9回分子科学討論会 2015年9月16日～19日 東京
3. 川口一朋、齋藤大明、長尾秀実 タンパク質の残基間相互作用に関する理論的研究 (ポスター) 第29回分子シミュレーション討論会 2015年11月30日～12月2日 新潟
4. Kazutomo Kawaguchi, Satoshi Nakagawa, Shogo Kinoshita, Hiroaki Saito, Hidemi Nagao. Theoretical study on effective interaction between protein molecules. (poster) The 56th Sanibel Symposium, February 14th-19th, 2016 St. Simons Island.
5. 川口一朋、齋藤大明、長尾秀実 水溶性タンパク質の会合・解離に関する理論的研究 (ポスター) 平成27年度日本生物物理学会中部支部講演会 2016年2月29日 岡崎
6. 川口一朋、齋藤大明、長尾秀実 疎水性アミノ酸残基間に働く有効相互作用に関する理論的研究 (ポスター) 日本物理学会第71回年次大会 2016年3月19日～22日 仙台

(3) その他

なし

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	180
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		