

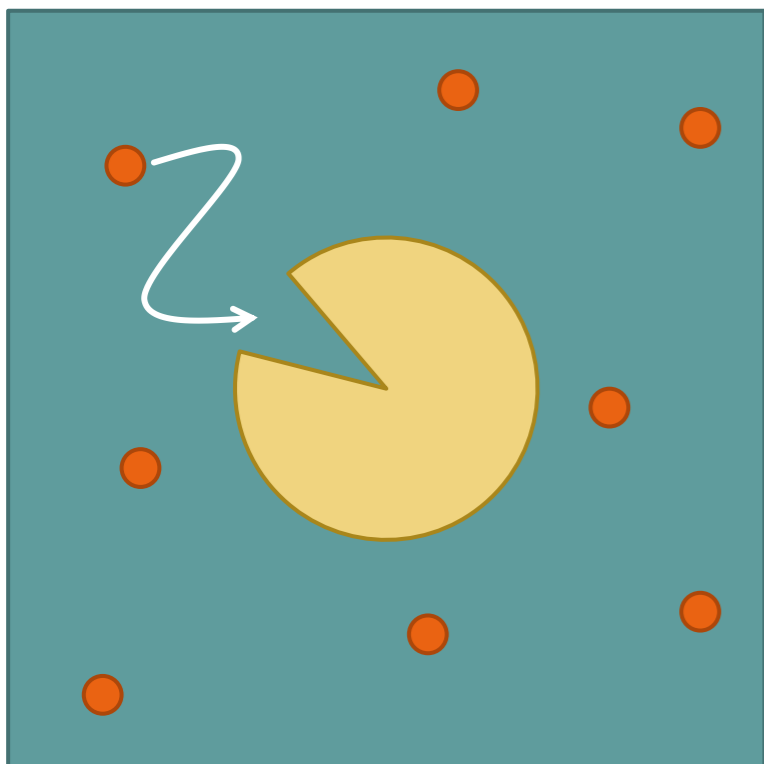
粗視化MDによるリガンド結合シミュレーション

[技術の概要]

タンパク質の周囲にリガンドをランダムに配置した状態から、リガンドがタンパク質表面上のリガンド結合部位に結合する過程を粗視化分子動力学シミュレーションにより再現する。

数 μ s程度のシミュレーションを初速とリガンド初期配置を変えながら100回程度繰り返し実施し、リガンド結合部位、リガンド結合ポーズ、結合・解離速度定数、解離定数、リガンド結合

パスウェイ等を予測する。

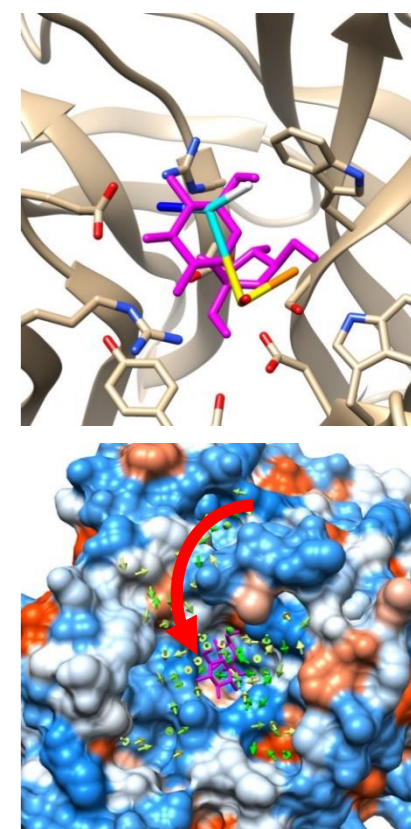


必要な情報:
タンパク質の立体構造 (ホモロジーマデル可)
リガンドの構造

[技術の利用例]

酵素 levansucrase と sucrose との結合シミュレーションの結果を示す。右上図のように、結合ポーズは結晶構造 (紫色) とよく一致し、結合・解離速度定数、解離定数も実験値をよく再現した。また、リガンド流束から、リガンド結合パスウェイが明らかとなった (右下図)。

J. Comput. Chem. **35**, 1835–1845 (2014).



連絡先

[所属] 東京大学

[名前] 寺田 透、清水謙多郎

[E-mail] tterada@iu.a.u-tokyo.ac.jp