

課題名 (タイトル) :

分子動力学シミュレーションを用いたタンパク質凝集機構解明

利用者氏名 : ○岡本 紳太郎、小須田慧司

所属 : 生命システム研究センター 生命モデリングコア 計算分子設計研究グループ

---

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

タンパク質が凝集することによってそのタンパク質が本来持つ立体構造や機能を失ってしまう。そのため、タンパク質実験や工学・医学的利用においてタンパク質凝集を制御することは重要な課題である。一方で、タンパク質凝集の詳細な機構は明らかになっていない。

本研究では、ペプチド凝集の全原子分子動力学 (MD) シミュレーションによる再現を試みた。ペプチドを構成するアミノ酸がペプチド凝集に与える影響について解析し、凝集性・溶解性についての相対的な評価を行なった。

2. 具体的な利用内容、計算方法

前年度に得られたデータの利用・保持に用いた。

3. まとめ

ペプチド凝集過程の系統的解析を世界で初めて成功した。静電相互作用や Van der waals 相互作用といった分子間相互作用によってペプチドの溶解性・凝集性が決定されることを示唆した。これらの成果を **Scientific reports** に発表した (利用研究成果リスト参照)。

平成 27 年度 利用研究成果リスト

**【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】**

著者：黒田裕、末永敦、佐藤雄士、小須田慧司、泰地真弘人

論文題名：All-atom molecular dynamics analysis of multi-peptide systems reproduces peptide solubility in line with experimental observations

Scientific reports 6 号、記事番号 19479. doi: 10.1038/srep19479.

2016 年 1 月 28 日発行