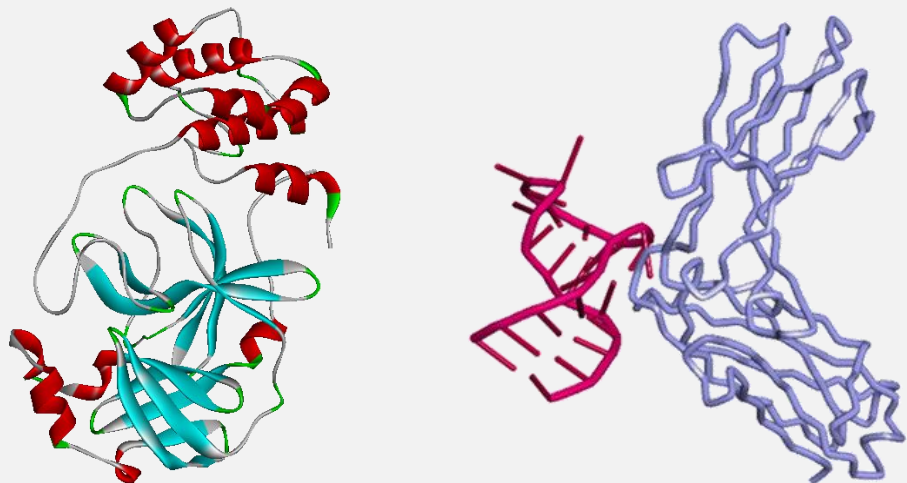


○佐藤 壱成¹, 山岸 賢司¹

1. 日本大学大学院工学研究科

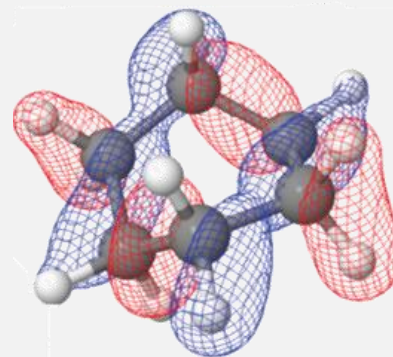
PDBを利用した分子シミュレーション

Protein Data Bank(PDB)
約20万種類の分子構造が登録



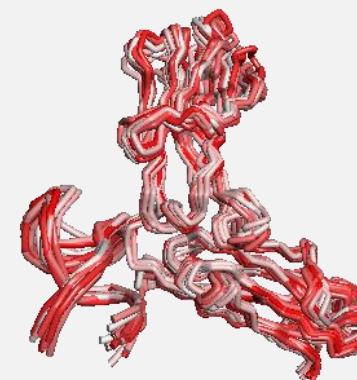
タンパク質: 158,324種 核酸分子: 13,246種
参照: <https://www.rcsb.org/stats> (2021年7月現在)

量子化学計算



分子の電子状態を解析

分子動力学(MD)計算

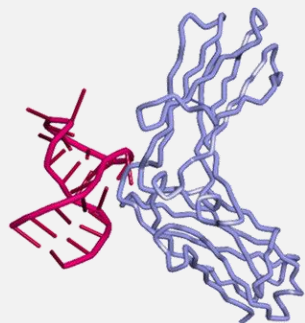


分子のダイナミクスを解析

⇒PDBデータを用いて、種々の分子シミュレーション解析を行い、
核酸アプタマーとタンパク質の結合メカニズムの解明を目指している

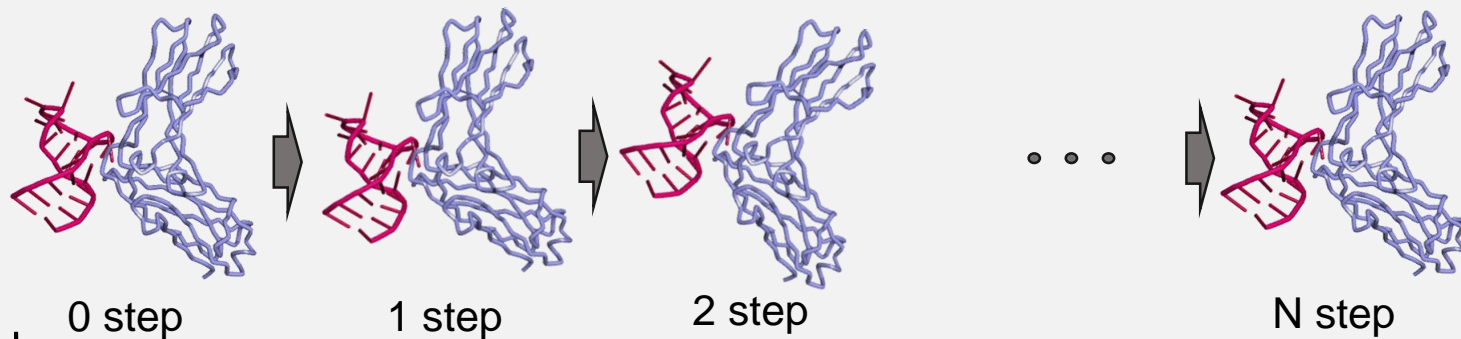
MD計算を用いた生体分子シミュレーション

PDBにより得られた構造情報ファイル



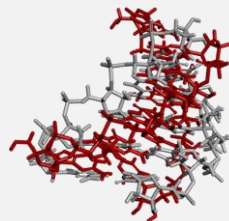
- ・座標による分子構造
- ・原子種
- ・原子タイプ
- ・残基の情報

MD計算 (トラジェクトリー)

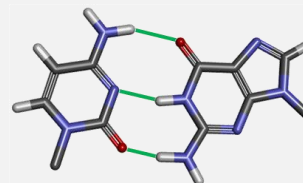


トラジェクトリーから、何をどう引き出すかが重要

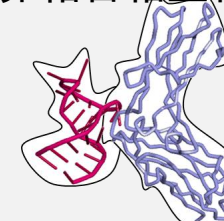
RMSD



原子間の位置関係



非結合相互作用

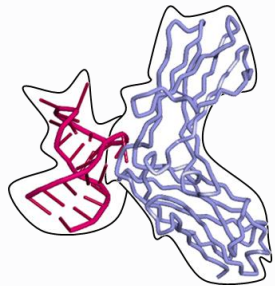


⇒トラジェクトリ解析ツールでは、様々なデータの抽出・解析が可能

MDトラジェクトリーから非結合性相互作用する解析スキーム

非結合性相互作用

- ・van der Waals相互作用
- ・静電相互作用



⇒生体分子の分子認識において重要な役割を担っている

分子間だけでなく、任意の部位間の非結合性相互作用の解析も必要

トラジェクトリ解析ツールによる任意の部位間の非結合性相互作用の解析

・トラジェクトリ解析ツール (cpptraj*)

- ⇒指定した原子間の非結合性相互作用が出力
- ⇒van der Waals相互作用と静電相互作用に分けて出力

・データ処理

- ⇒任意の部位を構成する原子間の非結合性相互作用を積算
- ⇒van der Waals相互作用と静電相互作用ごとに積算

*cpptraj: MD計算プログラムamberのトラジェクトリーを解析したり処理したりする汎用のプログラム

タンパク質や核酸などの生体高分子に対して、任意の部位間の非結合性相互作用を効率的に解析するデータ処理プログラムを構築

MDトラジェクトリーから非結合性相互作用する新たな解析スキーム

任意の部位間の非結合性相互作用を算出するため、汎用のトラジェクトリー解析ツールであるcpptrajの入出力を制御するデータ処理パイプラインを構築

