

計算科学で生体関連分子のミクロダイナミクスを視る

(北里大理¹・KISTEC²) ○渡辺 豪^{1,2}

Visualizing the microscopic dynamics of biorelevant molecules by computational science
(¹*School of Science, Kitasato University*, ²KISTEC)

To understand the structure and function of biomolecules and artificial polymers possessing biocompatibility, it requires capturing those detailed dynamics at atomic or molecular level. All-atom molecular dynamics (MD) simulation is known as one of the useful tools to investigate the microscopic dynamics of the molecules. We present several important insights to elucidate the mechanism of function and related structural changes of biorelevant molecules by means of MD simulations.

Keywords : *biomolecules; biocompatible polymer; molecular dynamics simulation*

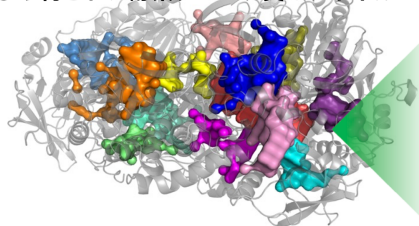
ポリペプチドや蛋白質などの生体分子、生体親和性を有する人工高分子材料において構造や機能を理解するためには、原子・分子レベルでのダイナミクスを詳細に捉える必要がある。その際の有用なツールの一つとして、分子動力学(MD)シミュレーションが挙げられる。特に、分子を構成する全ての原子をあらわに扱う全原子モデルを用いることで、各原子の動きを可視化できる。

例えば、巨大な酵素タンパク質における生成物や反応物の移動経路は、X線構造解析や生化学実験では明確にすることが困難であるが、MDシミュレーションを活用した自由エネルギー解析を基にして明らかにしている(下図)¹⁾。

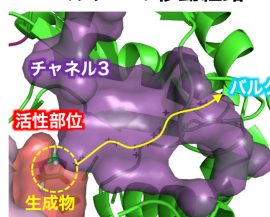
また、水中における超分子性ペプチドの自己集合化過程の追跡、集合構造の安定性評価をMDシミュレーションによって行ってきた^{2), 3)}。

本講演では、全原子MDシミュレーションを基盤とした計算科学的手法によって得られた、生体関連分子の機能発現機序の解明に関わる重要な知見を紹介する。

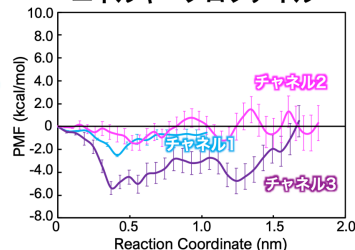
分子動力学シミュレーションと機械学習により得られた酵素タンパク質のチャンネル



生成物の活性部位からバルクへの移動経路



各移動経路における生成物のエネルギープロファイル



- 1) S. Yoneda, T. Saito, D. Nakajima, and G. Watanabe, *Proteins* **2021**, 89, 811.
- 2) A. Ishida, G. Watanabe, M. Oshikawa, I. Ajioka, and T. Muraoka, *Chem. Euro. J.* **2019**, 25, 13523.
- 3) A. Ishida, M. Oshikawa, G. Watanabe, H. Hiramatsu, N. Uchida, C. Hara, N. Kaneko, K. Sawamoto, T. Muraoka, and I. Ajioka, *Nat. Commun.* **2021**, 12, 6623.