

## 分子動力学から得られた水中でのペプチドの自由エネルギー地形

肥後順一(東京薬科大学生命科学部)

ペプチドやタンパク質の構造空間は多次元であり、ポテンシャルエネルギー(構造エネルギー)面には多数のエネルギー極小点が存在する。この構造空間の複雑さが、これまでコンピュータを用いて立体構造探索を行う上で困難をもたらしていた。そこで我々は、効率的な構造探索のためにマルチカノニカル分子動力学法を開発し様々な系に適用してきた。それにより水中でのペプチドの自由エネルギー地形を得て、そこに存在する様々な安定構造や安定構造間の構造変化の仕方を解析してきた。自由エネルギー地形から導かれる室温での熱力学的に安定な立体構造は、実験で得られている結果とも一致する。また、自由エネルギー地形上には二次構造要素からなる準安定な構造クラスターも見ることができる。このような性質をもつ自由エネルギー地形は、タンパク質の折れ畳みを理解するためのキーになるかもしれない。