

# 「富岳」を用いた新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測

理化学研究所 杉田有治

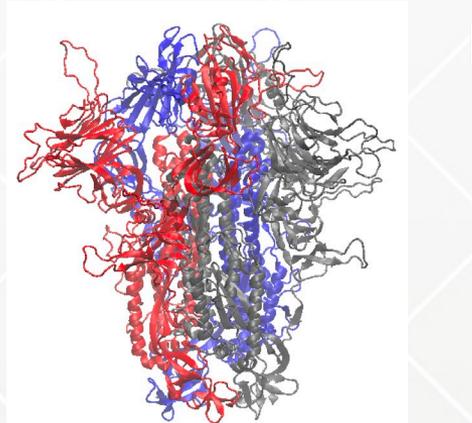
## 実施内容：

新型コロナウイルスが細胞に侵入する際に、ウイルス表面に存在するタンパク質が細胞表面にあるレセプタータンパク質に認識される。このウイルス侵入の初期過程を阻害する薬剤を開発することは、新型コロナウイルスの治療に役立つと期待される。

本研究では、クライオ電子顕微鏡によって解かれたウイルス表面タンパク質の立体構造を初期モデルとして、その立体構造の動きを「富岳」を用いた分子動力学計算で予測する。特に、理研で開発している分子動力学ソフトウェアGENESISは、「富岳」に最適化されており、「京」と比較して125倍のアプリケーション性能を持つ。さらに、タンパク質内で注目すべき一部分の運動を加速する手法（gREST法）を「富岳」の利点である並列計算として使うことで、他の手法では実現できない大きな構造変化を予測する。

## 期待される成果：

- 実験的には得ることのできないウイルスの動的構造を予測することで、レセプタータンパク質との結合状態を理解する。
- 分子動力学計算で得られた立体構造を用いることで、レセプターとの結合を阻害する薬剤分子開発を促進すると期待される。

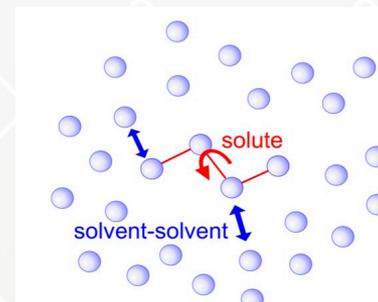


ウイルス表面のタンパク質



GENESIS

Generalized-ensemble simulation system



一部分の運動を加速するgREST法