

# 新型コロナウイルス表面のスパイク タンパク質の構造ダイナミクス のシミュレーション

杉田有治  
理化学研究所



**FIGHT Against  
COVID-19**



# スパイクタンパク質表面の糖鎖の役割を分子動力学シミュレーションで解明

クライオ電顕による立体構造解析 (中国・米国)



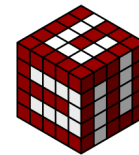
## シミュレーションで明らかになったこと

- 左図で示すように、ダウン型とアップ型それぞれの立体構造を安定化するように糖鎖が蛋白質構造を「補強」している
- 糖鎖構造は非常にやわらかいのでクライオ電顕では観察できない

## この計算から期待されること

- 今後のワクチンや治療薬の開発において、スパイクタンパク質の構造揺らぎや糖鎖の役割を考慮することができる

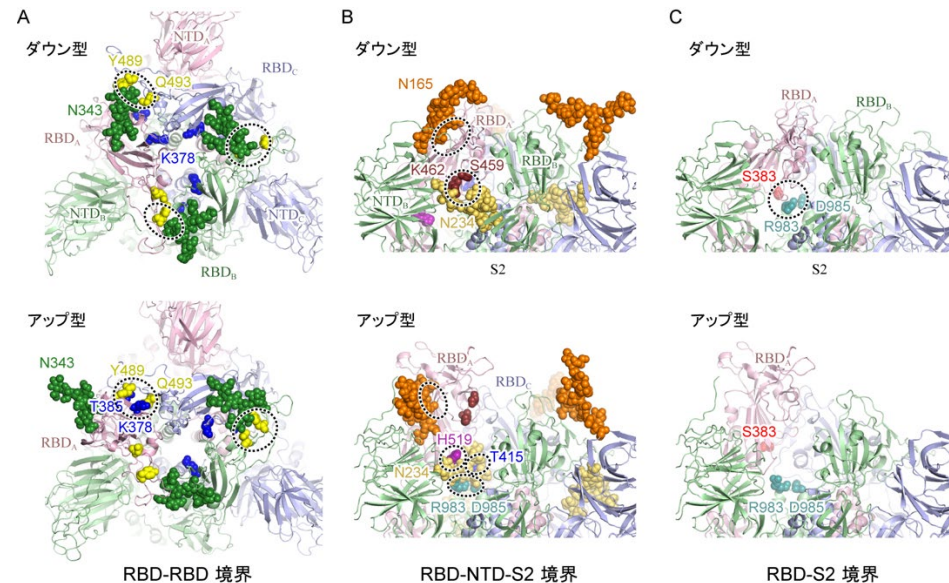
「Oakforest-PACS」(JCAHPC) と「富岳」を用いて、理研で開発している分子動力学ソフトウェアGENESISによるシミュレーションを実施した



# GENESIS

Generalized-ensemble simulation system

<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/>



T. Mori et al. *Biophysical J.* (2021) in press.