

タンパク質の折りたたみ問題って何?

タンパク質はアミノ酸がつながったひもです。

自然界ではタンパク質は正しく折りたたまれています。

正しく折りたたまれた構造を予測することをタンパク質の折りたたみ問題といいます。

実際のタンパク質は3次元ですが、3次元のタンパク質モデルを解くのはとても

難しいのでここでは2次元のタンパク質モデルの折りたたみにチャレンジしてください。

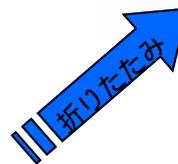
アミノ酸の一次元配列 例 プロテインG (56個のアミノ酸がつながったもの)

Mt-Thr-Tyr-Lys-Leu-Ile-Leu-Asn-Gly-Lys-Thr-Leu-Lys-Gly-Glu-Thr-Thr-Thr-Glu-Ala-Val-Asp-Ala-Ala-Thr-Ala-Glu-Lys-Val-Phe-Lys-Gln-Tyr-Ala-Asn-Asp-Asn-Gly-Val-Asp-Gly-Glu-Thr-Thr-Thr-Thr-Thr-Val-Thr-Glu

タンパク質の立体構造



赤: α ヘリックス
黄: β シート



タンパク質モデル

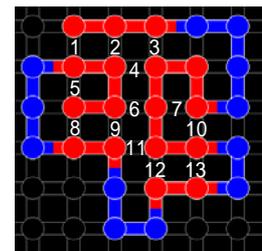
青い円は水と仲がよい部分、赤い円は油と仲がよい部分を表しています

平面の格子上的のみ、赤い円や青い円を置くことができます

直接つながっていない赤い円が隣り合うと1点になります(右の例では計13点)

もっとも得点が高いのが安定構造です

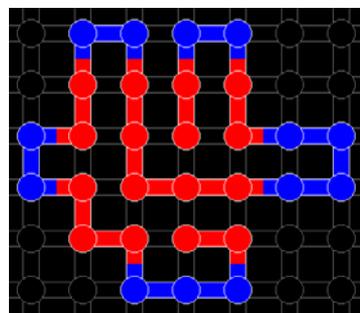
自然界のタンパク質の立体構造では、油と仲がよい部分が集まりやすいことが知られています



折りたたみの目標

自然界のタンパク質をまっすぐに伸ばしても、時間が経つと元の立体構造に戻ります

今回は伸びたタンパク質モデルをコンピューター上で折りたたんで、安定構造を目指してみましよう



14点が最高点で、安定構造です

折りたたみ体験の操作方法

- (1) 「ゲーム」メニューから「新規」を選びます
- (2) 粒子の数を入れます
(やさしい: 10~19、ふつう: 20~29、むずかしい: 30~35、とてもむずかしい: 36~60)
- (3) マウスを使つての操作方は、「ヘルプ」メニューから「latfoldヘルプ」をご覧ください
- (4) 開始後、コンピューターも問題を解き始め、最高点を更新したら画面左に解けた時間を括弧で表示します
- (5) 人間が最高点を更新したら、画面左に解けた時間を表示します
- (6) コンピューターが求めた最高点と人間が求めた最高点が一致したら完成です