

課題名(タイトル):

## 計算機による結合自由エネルギー評価手法の研究

利用者氏名:

小松輝久

理研における所属研究室名:

生命機能科学研究センター計算分子設計研究チーム

- 
1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

タンパク質などの生体高分子の機能は、細胞の代謝や恒常性の維持、集団としての同期、分化といった様々な過程を形作る基礎となっている。これらの機能を低分子薬剤によって阻害することなどを通じた機能の制御を目指し、目的に応じた有益な低分子のデザインを計算機シミュレーションによって探索することが求められている。このためには、結合自由エネルギーの評価手法を開発し、信頼性等の評価を積み重ねていく地道な研究が必要である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

圧力制御のアルゴリズム検討を行った。

3. 結果

膜系の制御の安定性、アルゴリズム依存性を調べるには長時間の計算によって検討する必要があり、次年度以降、引き続き検討課題とする。

4. まとめ

圧力制御の高速化、安定性等の検討を始めたが、長時間の軌道を用いた検討が必要となるため、来年度、引き続いて行う。

5. 今後の計画・展望

圧力制御アルゴリズムの性能検討を行い、利用するアルゴリズムの選択、開発を進める。