

プロジェクト名(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(1)

理研における所属研究室名: (1)生命機能科学研究センター 計算分子設計研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、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ことが必要である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

今年度は分子動力学計算に必要な古典力場のトポロジー作成環境を整え、数万分子のトポロジーを作成するために必要な gaussian16 による計算を行った。

3. 結果

Gaussian16 の計算が終了しない例があり、手動で再計算等によって完了することができる場合もあったが完全には解決できない例もあった。

4. まとめ

多数の分子動力学計算を処理するためには、トポロジーの速やかな自動作成が望ましいが、現時点では完全な自動化は難しかった。手動で対応することで、概ね実際の応用事例に利用するトポロジーの作成は行えた。

5. 今後の計画・展望

分子動力学に供する大量のトポロジー作成によって、広範な化合物を対象とした分子動力学の実行をたやすく行う環境をより簡便に用意する必要がある。

2021 年度 利用研究成果リスト
なし