

分子動力学シミュレーションによる生体高分子メカニズムの解明と創薬応用

理学研究科 情報理学研究室 尾嶋 拓



キーワード

分子動力学シミュレーション、タンパク質、創薬、バイオインフォマティクス

研究概要

分子動力学シミュレーションを用いて、タンパク質等の生体高分子の分子メカニズムの研究を行っています。特に、創薬およびシグナル伝達において重要なタンパク質-リガンド結合の問題を扱っていますが、問題の複雑さのためにスパコンを用いても膨大な計算時間がかかってしまいます。効率的なサンプリングのために拡張アンサンブル法や自由エネルギー計算法を開発し、計算ビッグデータの解析のために機械学習・AIとの融合を進めています。開発した方法論やソフトウェアを、結合親和性予測等の創薬への応用だけでなく、材料科学シミュレーションへも応用し、高分子材料開発等の「ものづくり」への貢献も行います。

アピールポイント

実験での観測が難しい分子どうしの相互作用を「観る」ことができる分子動力学シミュレーションは、分子メカニズムの解明だけでなく、新規薬剤開発や材料開発等の「ものづくり」において重要な示唆・情報を与えてくれます。分子動力学計算ソフト「GENESIS」の自由エネルギー摂動法の開発やCHARMM-GUIとの連携も行っており、企業への高精度親和性予測に関する技術指導・共同研究の実績があります。

応用分野

創薬、高分子材料開発など。

分子動力学シミュレーション

- ・ 拡張アンサンブル法・自由エネルギー計算
- ・ 機械学習・AI
- ・ ソフトウェア開発

スパコン・GPUを活用



GENESIS

Generalized ensemble simulation system



応用

生体分子機構・創薬

- ・ 親和性予測
- ・ 遺伝子変異
- ・ 分子デザイン

高分子材料開発

- ・ 吸着
- ・ 摩擦
- ・ 触媒
- ・ 大規模計算