

分子スケールに関する研究

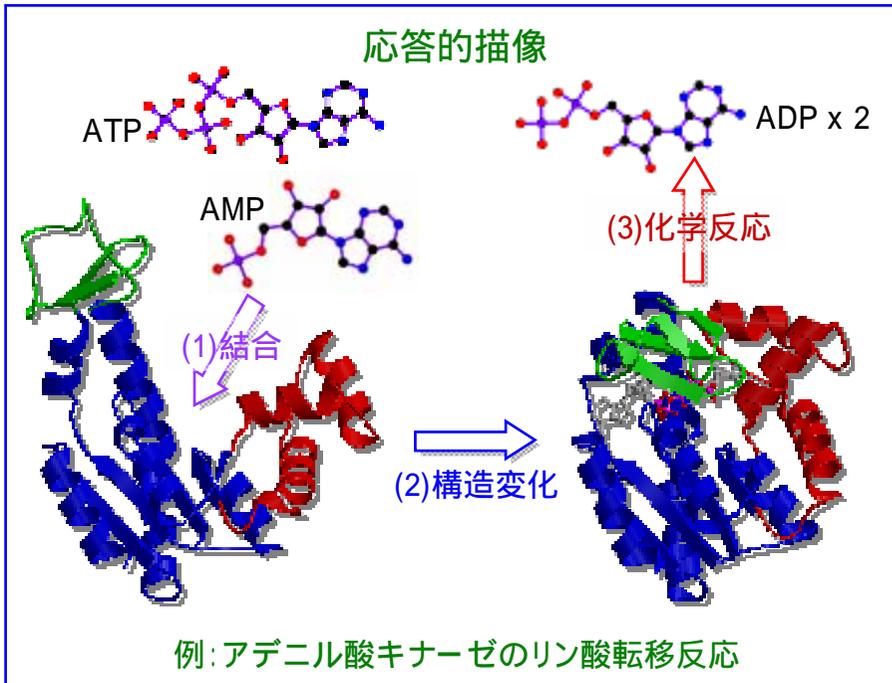
目的

生命活動の分子基盤であるタンパク質などの生体高分子が生体内で担っている機能をシミュレーションによって捉えることにより分子生物学・細胞生物学の課題を解明し、さらには新たな薬剤開発につなげることを目的とする

観点 生物機能をどうシミュレーションで捉えるか?

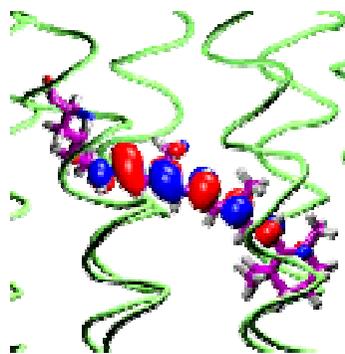
タンパク質における生物機能の応答的描像

「**基質結合**、環境因子の変化などの外部からの**摂動**に対する**応答**として開始される一連の**構造変化**とそれに伴う**化学反応**」



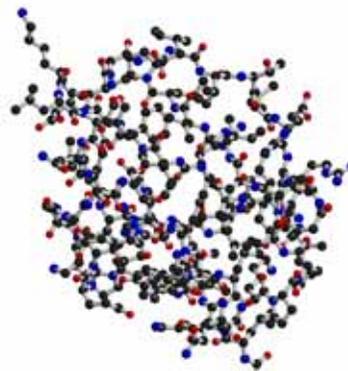
手段 分子スケール研究は以下の3つのスケールの計算を総合して行う

量子化学計算



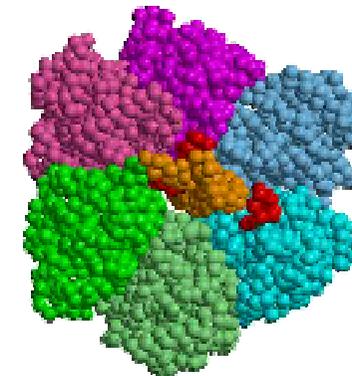
第一原理計算

分子動力学計算



分子力場計算

粗視化モデル計算



1粒子 = 1アミノ酸などの粗視化
データベースから得た経験的ポテンシャル

より小さく
より短時間
より厳密

より大きく
より長時間
より近似的