

酵素・補酵素複合体の分子モデリング
Molecular Modeling of Enzyme-Ligand Complex

岡山大学 グローバル人材育成院 田村 隆

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ペプチド系抗生物質 Goadsporin の密度汎関数計算を行い、Amber 力場を利用して本ペプチド分子の分子動力学計算を行うための分子力場パラメータの作成を行った。Goadsporin の初期構造は ChemDraw を用いて平面図として構造式を描いた。これを Chem3D で読み込んで立体構造を構築して、これを統合計算化学システム MOE において Amber99 力場による構造最適化を行った。これを初期構造として京大化研スパコンにて GaussView で読み込み、Molecular Mechanics による分子力場計算、AM1 による半経験的分子軌道計算を行い、さらに B3LYPS による密度汎関数 (DFT) 計算を行った。DFT 計算の最適化構造を HF 法によるエネルギー計算を行った。Antechamber コマンドによる電荷計算を行い、分子構造は MOL2 フォーマットに変換して出力した。不足した力場は frcmod で追加して補ない、Na⁺で電荷中和した。

