

# 単一アミノ酸ポテンシャル(SAAP)力場の改良と応用

東海大学理学部化学科 氏名 出立兼一

目的: 当研究室で開発中の新規分子力場であるSAAP力場、及びそれを用いた分子シミュレーションプログラムの改良と応用研究を行うこと。

研究の概要:

1. SAAP力場のポテンシャル(エネルギー項及び静電項)を、より精度の高い量子化学計算から求めて、力場を改良する。
2. 改良した力場の精度を、Chignolinを対象構造として検証する。
3. グルタチオンペルオキシターゼ(GPx)の活性中心の構造を探索する。

研究の結果:

1. Gaussian09を用いて、力場のパラメータを改良した。
2. 改良の結果、Chignolinの構造探索効率が大幅に向上した。
3. GPxの活性中心モデルの構造を広く探索できるようになった。

利用した計算機: PCクラスター  
CPU時間: 約7000時間  
使用メモリ: 500MB

