

hp200152

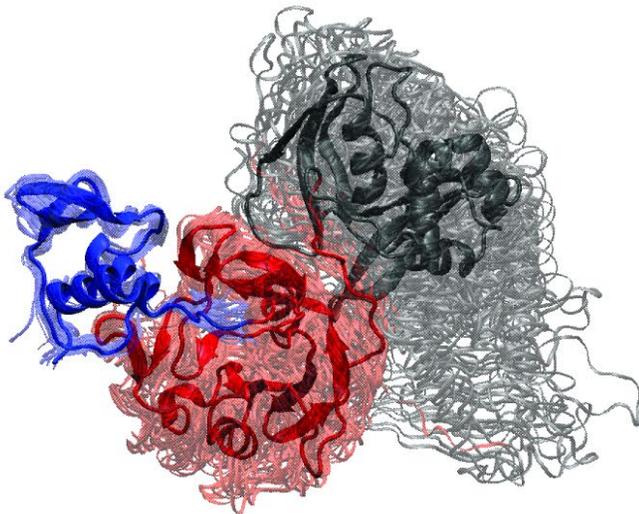
COVID-19エンドリボヌクレアーゼのオリゴマー化阻害剤開発



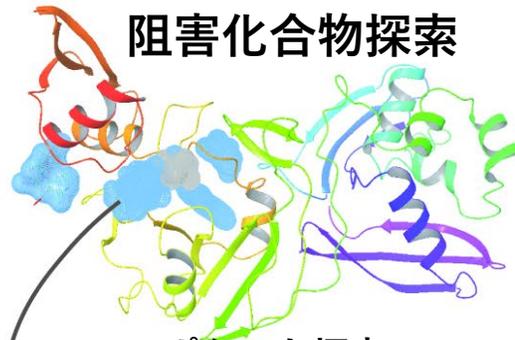
北尾彰朗、竹村 和浩、TRAN, Phuoc Duy、宮澤 佳希、尾川 拓巳、平 悠太、三栖 涼雅

東京工業大学生命理工学院

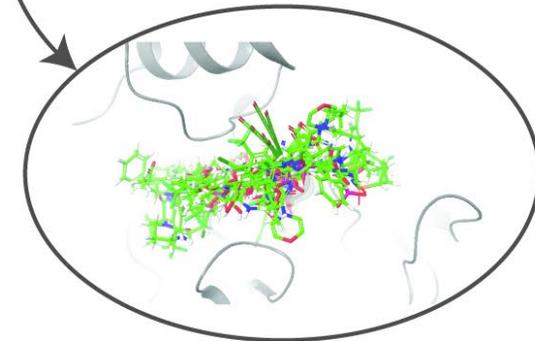
単量体立体構造サンプリング



阻害化合物探索



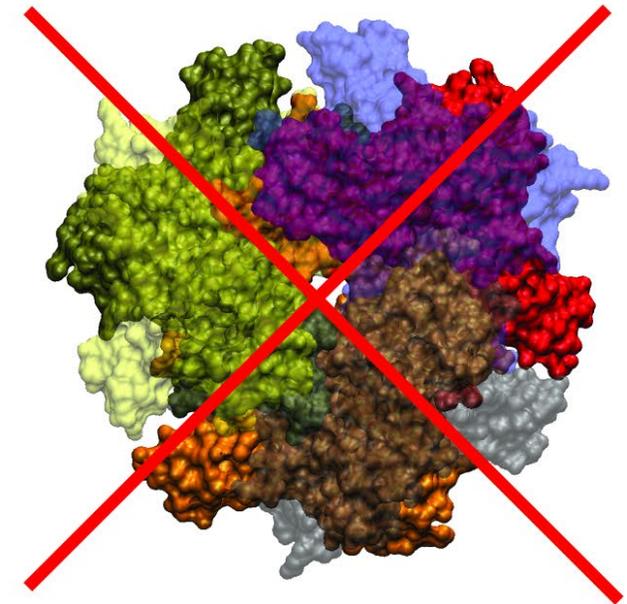
ポケット探索



化合物スクリーニング



オリゴマー化阻害



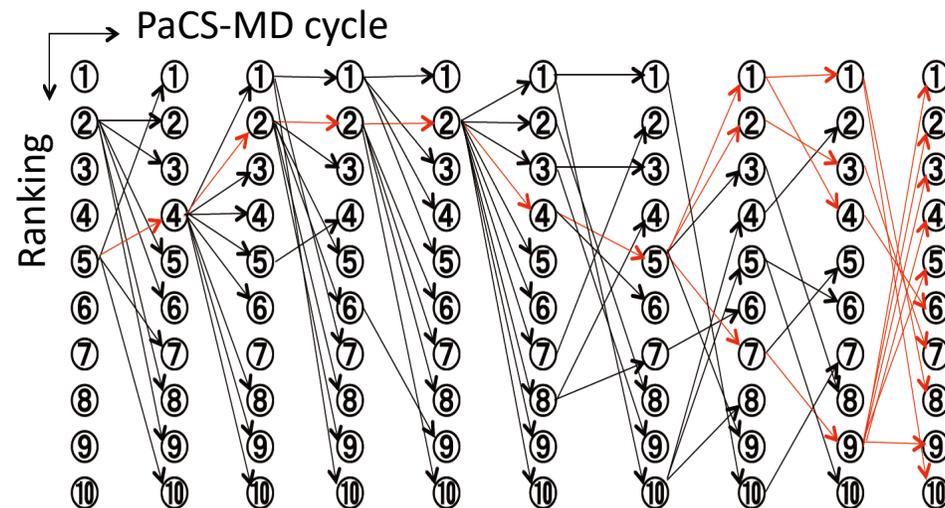
オリゴマー化阻害剤開発を可能にする新規シミュレーション技術

• PaCS-MD/MSMによる立体構造変化予測・結合予測

立体構造変化予測を可能にする
並列カスケード選択MD法 (PaCS-MD)

マルコフ状態モデル(MSM)と組み合わせた
結合予測 (PaCS-MD/MSM)

取りうる立体構造を高速に探索する超並列計算



化合物の結合能を高精度に評価する超並列計算

