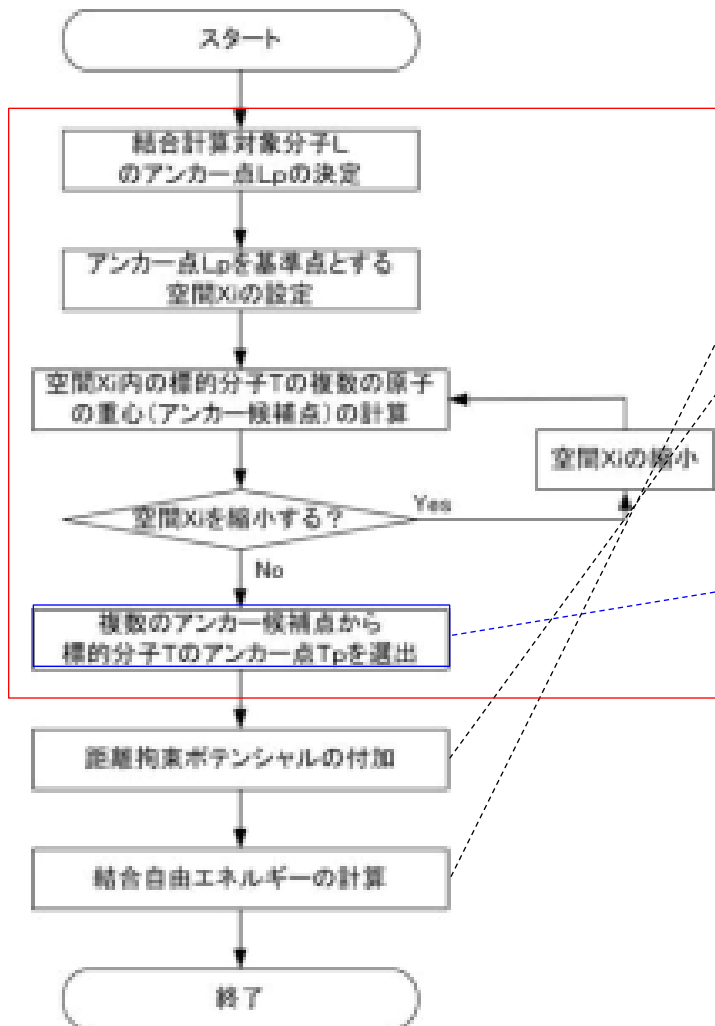


IT創業の事例

富士通(株)「結合自由エネルギーの算出方法、及び算出装置、並びにプログラム」 特許第6652733号 2020/1/28登録 2016/5/16出願

【概要】複数の標的分子、及び、標的分子のアンカー点と標的分子の重心との距離に基づいて、標的分子のアンカー点を決定する。

【効果】結合計算対象分子と標的分子との結合自由エネルギーの計算精度を向上できる。



【請求項1】

コンピュータを用いた、結合計算対象分子と標的分子との結合自由エネルギーの算出方法であって、

前記結合計算対象分子と前記標的分子との間に距離拘束ポテンシャルを付加する工程を含み、

前記距離拘束ポテンシャルを付加する際の前記標的分子のアンカー点を、前記結合計算対象分子のアンカー点から所定の距離内にある前記標的分子の複数の原子に基づいて決定し、

かつ前記標的分子のアンカー点と前記結合対象分子のアンカー点との距離が、前記標的分子のアンカー点と前記標的分子の重心との距離よりも短くなるように、前記標的分子のアンカー点を決定する、

ことを特徴とする結合自由エネルギーの算出方法。

