

## P-29 八木 清

理化学研究所 杉田理論分子科学研究室

e-mail: kiyoshi.yagi@riken.jp

2004年 東京大学工学系研究科応用化学専攻 博士号（工学）取得

2005年 東京大学工学系研究科応用化学専攻 助手・助教

2009年 山梨大学燃料電池ナノ材料研究センター 講師

2011年 米国イリノイ大学アーバナシャンペーン校

Research Assistant Professor

2012年 理化学研究所杉田理論分子科学研究室 研究員

2015年 理化学研究所杉田理論分子科学研究室 専任研究員



### QM/MM 法に基づく反応経路探索法の開発と酵素反応への応用

酵素反応は、常温・常圧のマイルドな条件にも関わらず、目的の反応を高い選択性と収率で実現させており、その分子機構を理解することは極めて重要である。これまで、反応系を量子化学計算 (QM) で、タンパク質環境を分子力場 (MM) で扱うハイブリッド QMMM 法を当グループで開発しているプログラム GENESIS に実装した。本研究では、QMMM 法に基づき、反応経路を探索する方法を開発し、酵素反応へ応用する。