



# 佐藤文俊研究室

## [生体分子やナノ分子の革新的なシミュレーション]

生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター  
Center for Research on Innovative Simulation Software

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp>, <http://satolab.iis.u-tokyo.ac.jp>

計算生体分子科学

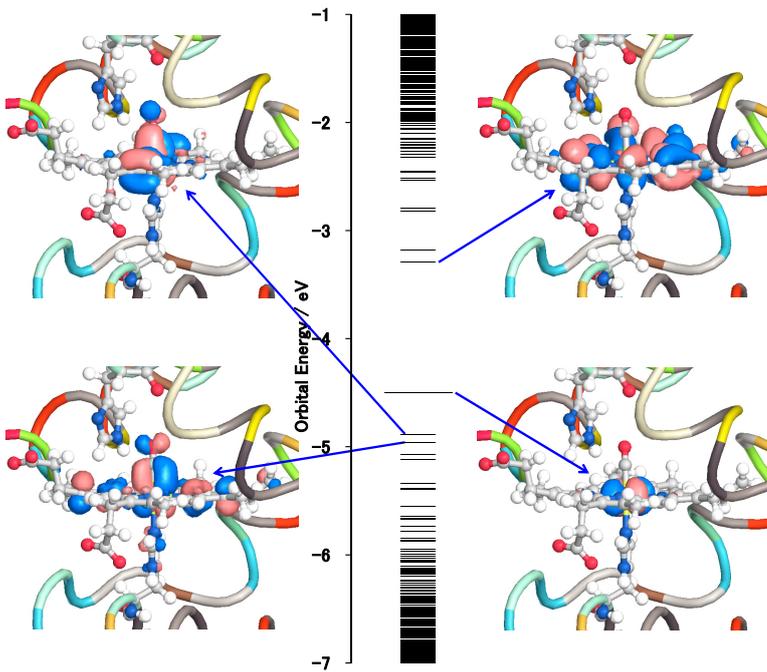
工／機械工学専攻

### ProteinDFによるタンパク質全電子計算

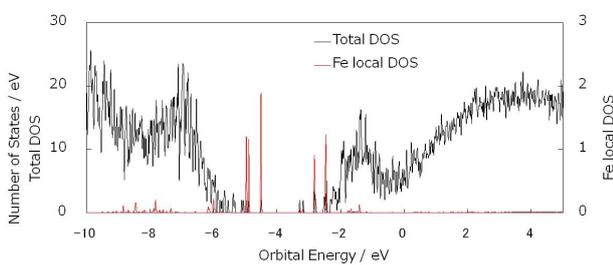
All-Electron Calculations on Proteins by ProteinDF

タンパク質が持つ全ての電子の分子軌道が計算できる、世界でも類を見ない量子化学計算ソフトウェア“ProteinDF”を開発。

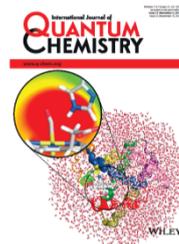
基礎研究のみならず、新規酵素や創薬設計などの応用研究にも有用な、生体分子の反応を精密に解析する実用的なシミュレーションシステムを構築しています。



一酸化炭素結合型ミオグロビンの分子軌道

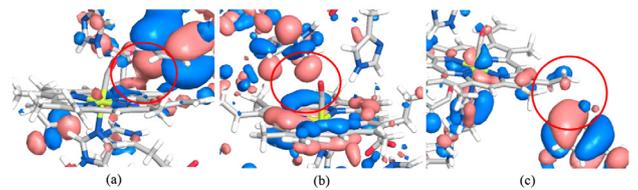


状態密度解析

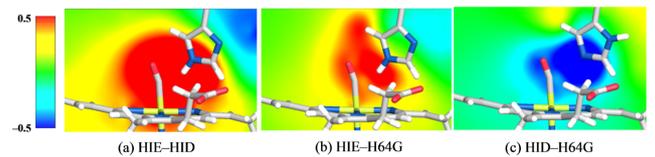


← 詳しくは

方法に興味のある方:  
T. Hirano, F. Sato, *PCCP*, 2014.  
DOI: 10.1039/C3CP55514C.



アミノ酸残基の役割が明確に



アミノ酸残基置換効果や水素の位置の違いまで



各種教科書あり☑