



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センター

Center for Research on Innovative Simulation Software

機械工学専攻

計算生体分子科学

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

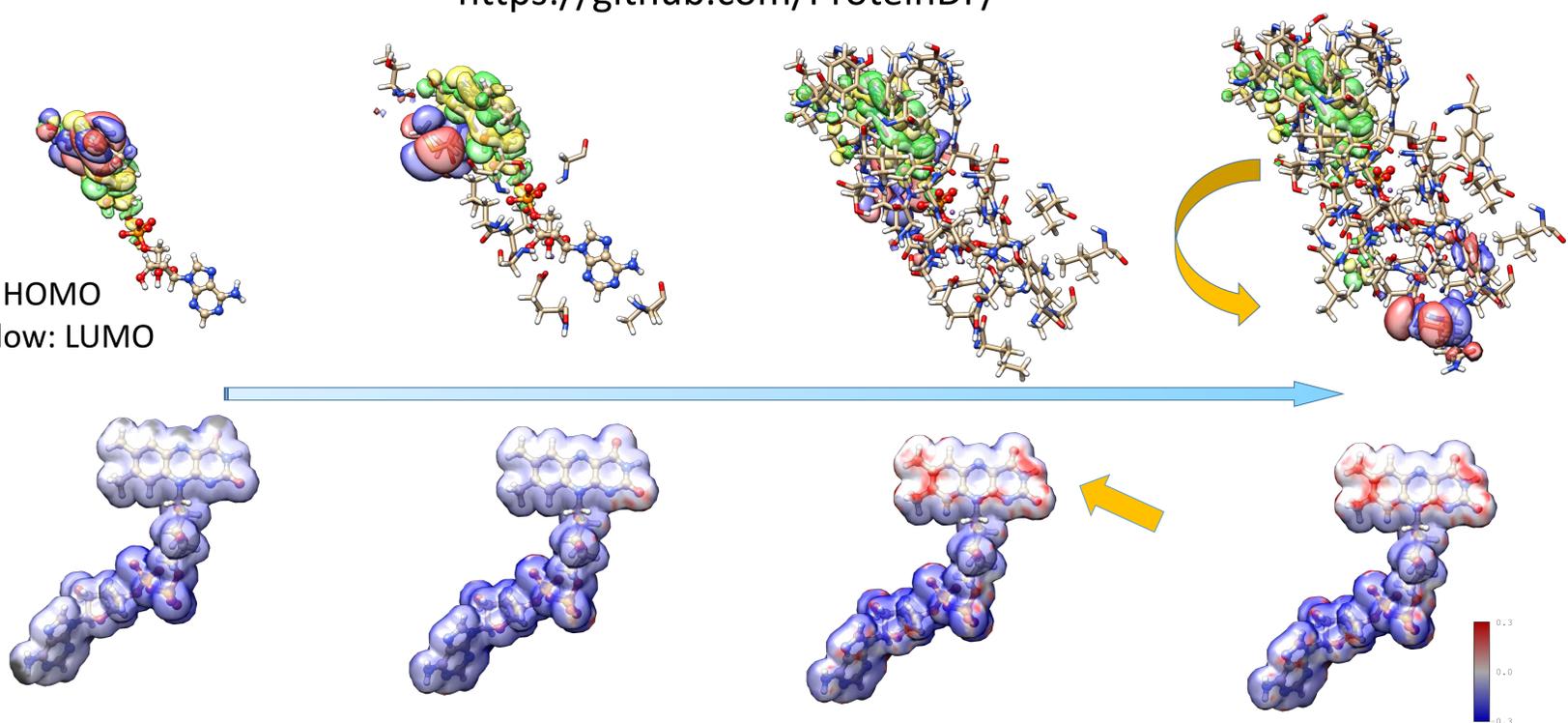
大規模正準分子軌道計算が切り拓く未来

Large-Scale Canonical Molecular Orbitals Study Has Great Potential in Shaping the Future.

タンパク質などのナノサイズの分子が持つ**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

<https://github.com/ProteinDF/>

MO:
Blue, Red: HOMO
Green, Yellow: LUMO



The ESP mapped on the active center (FAD) surface

タンパク質の電子の典型的な役割



各種教科書あり☑