



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

計算生体分子科学

機械工学専攻

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

量子化学計算を用いたタンパク質のデザイン

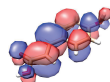
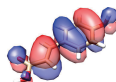
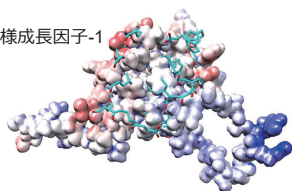
Protein Design by Quantum Chemical Calculation

タンパク質の全ての正準分子軌道が計算できるソフトウェア“ProteinDF/QCLO”を開発

<https://proteindf.github.io/>

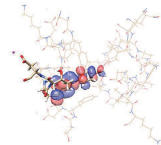
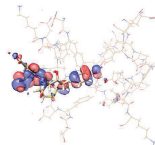
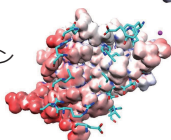
これらを用いてタンパク質の設計を行っています

インスリン様成長因子-1



最適化構造の p-クマル酸 (pCA) の HOMO (左) と LUMO (右)

インスリン



インスリン様成長因子-1とIGF-1R受容体 (上),
インスリンとIGF-1R (下) との相互作用サイト。
表面に静電ポテンシャルを描いている。

光活動性黄色タンパク質 (PYP) の pCA+35 残基
モデルの HOMO-3 (左) と LUMO (右)



各種教科書あり

