



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

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

<http://www.ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

<https://npem.iis.u-tokyo.ac.jp/>

機械工学専攻

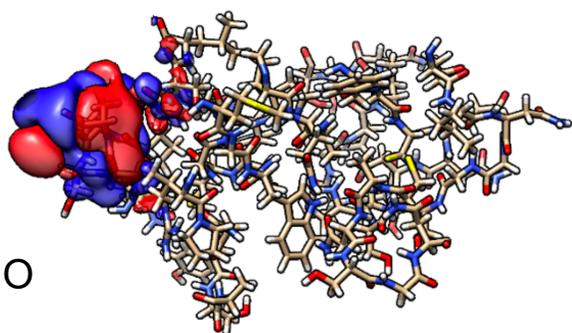
量子化学計算を用いたタンパク質のデザイン

Protein Design by Quantum Chemical Calculation

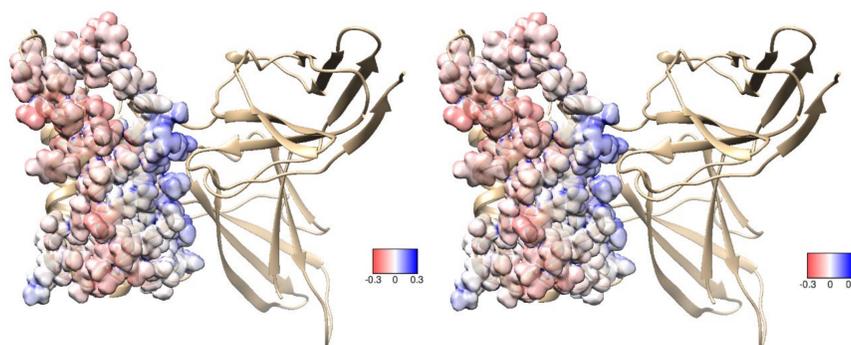
タンパク質の全ての正準分子軌道が計算できるソフトウェア“ProteinDF/QCLObot”を開発

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

これらを用いてタンパク質の電子状態解析・設計を行っています

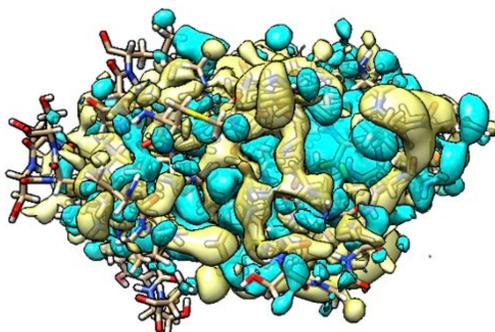


HOMO

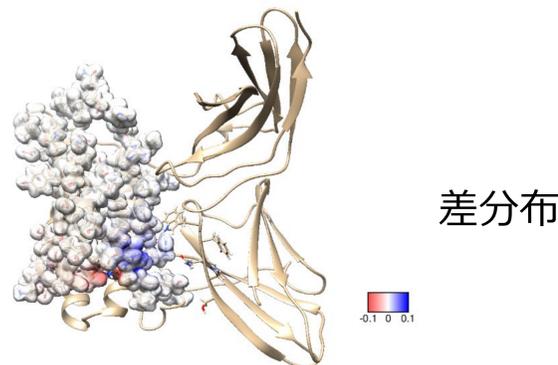


Lys23Arg

IFN α 2



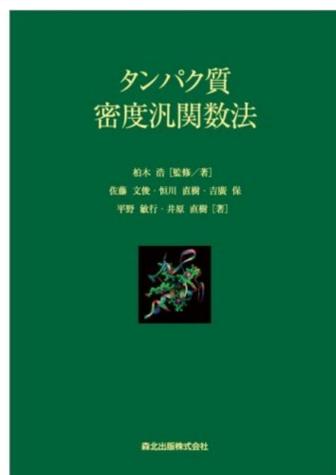
LUMO



差分布

PETaseの活性中心周り57残基モデルによる
HOMO (上) と LUMO (下)

インターフェロン α 2 (右上)、Lys23Arg変異体 (左上)、およびそれらの差分 (下) の静電ポテンシャル分布。リボンモデルは受容体である。



各種教科書あり☑