



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>

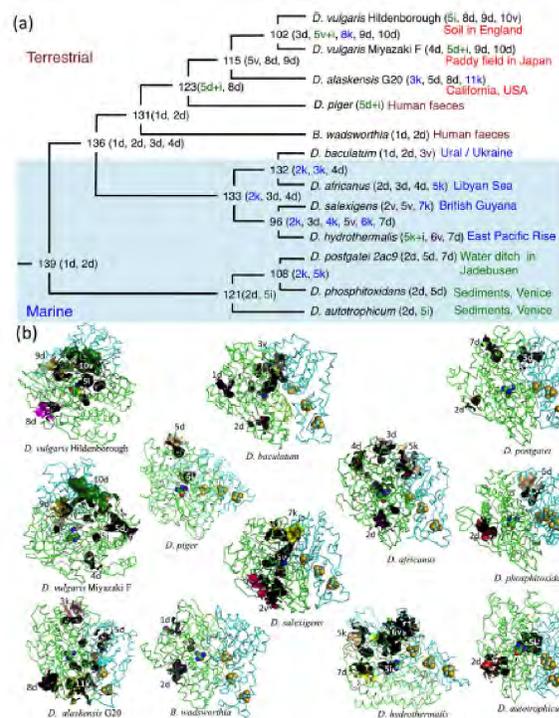
量子化学計算を用いたタンパク質のデザイン

Protein Design by Quantum Chemical Calculation

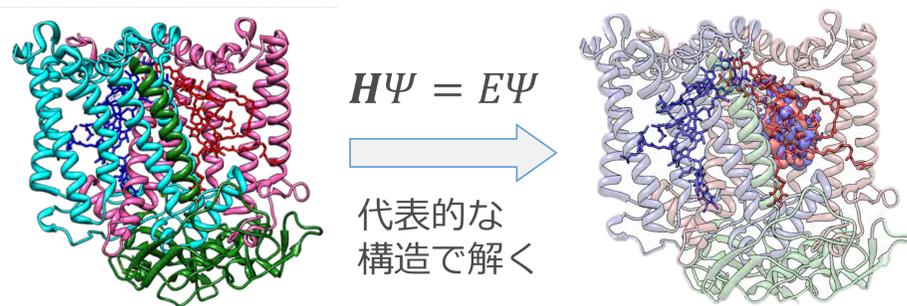
タンパク質全ての分子軌道が計算できるソフトウェア“ProteinDF/QCLO”を開発

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

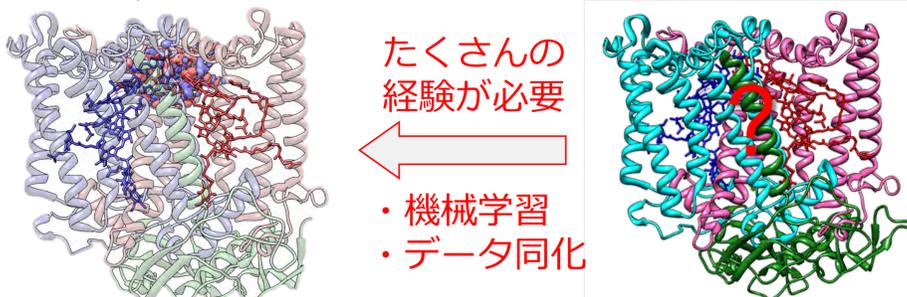
これらを用いてタンパク質の設計を行っています



演繹法 ; なにがすでに影響を及ぼしているのか



帰納法 ; どこを変えれば新たに影響を与えるるか



従来の方法 ; 遺伝子系統樹, ホモロジーモデリング, 分子動力学法

本方法 ; タンパク質の正準分子軌道解析



各種教科書あり☑