



佐藤文俊 研究室

[タンパク質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.ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp>, <http://satolab.iis.u-tokyo.ac.jp>

専門分野 ● 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

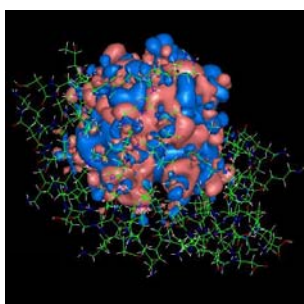
タンパク質が持つ全ての電子の軌道が計算できる、世界でも類を見ない量子化学計算ソフトウェアProteinDFの開発に成功しました。基礎研究のみならず、創薬・バイオ素材設計などの応用研究にも有用な、生体分子の反応を精密に解析する実用的なシミュレーションシステムを構築しています。



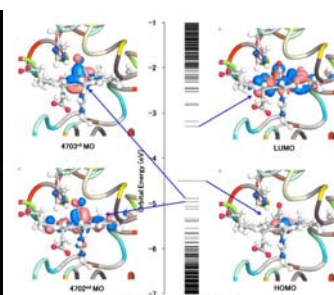
教科書・使用書
絶賛発売中

★文部科学省「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」、「次世代生命体統合シミュレーションの研究開発」の各プロジェクトに参画中です。

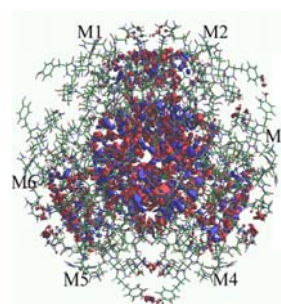
- ◆世界で初めて金属タンパク質シトクロムcの全電子計算に成功
- ◆世界最大分子軌道計算チャンピオンデータ保持/更新中
- ◆酵素反応解析/光合成反応中心機能解明/長距離電子移動機構研究
- ◆量子化学計算による分子分光学的スペクトル解析の研究
- ◆ナノ分子を含むモデリング機能と全シミュレーションをサポートするGUIの研究



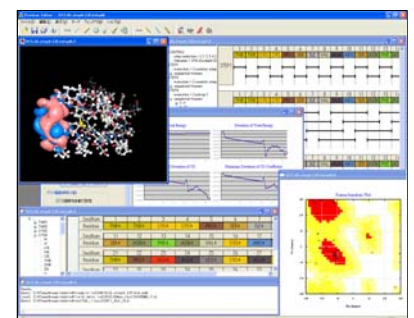
シトクロムcの最高被占軌道



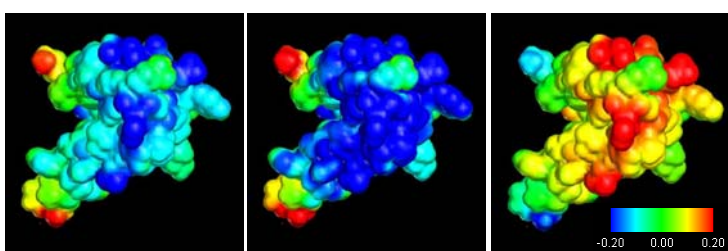
一酸化炭素結合型ミオグロビンの分子軌道



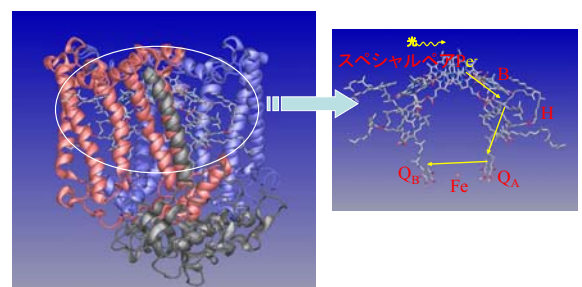
インスリンの凝集による電子の移動



GUI: ProteinEditor



インスリンの静電ポテンシャル
(左)全電子計算 (中)古典計算 (右)全電子計算と古典計算の差



光合成反応中心タンパク質