



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

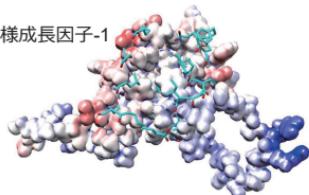
Protein Design by Quantum Chemical Calculation

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

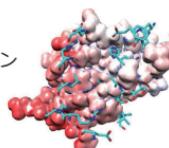
<https://proteindf.github.io/>

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



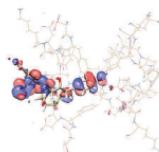
インスリン



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。



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



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

タンパク質
密度汎関数法

佐藤文俊著
東京大学出版会

プログラムで実践する
生体分子量子化学計算

佐藤文俊著
東京大学出版会

「計算生物学コレクション」

ソフトウェア開発入門

ソリューションズ・ラボラトリー

「計算生物学コレクション」
ソフトウェア開発実践

科学技術シミュレーションアプローチの設計

