

佐藤（文）研究室



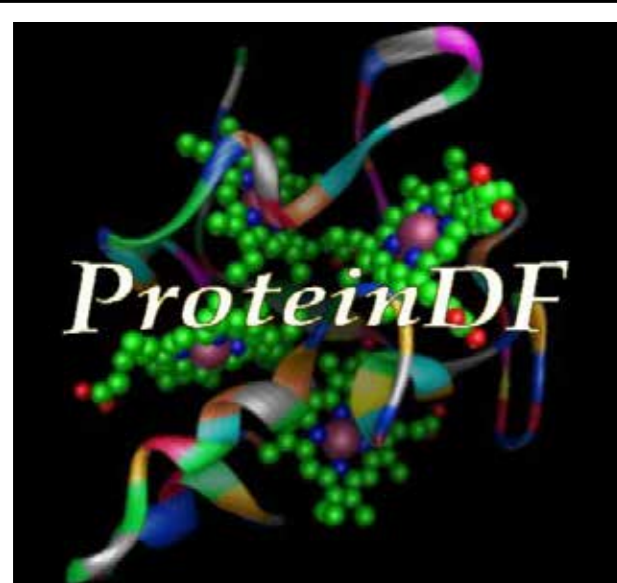
生体分子やナノ分子の革新的なシミュレーション

革新的シミュレーション研究センター

計算生体分子科学

工学系研究科 機械工学専攻

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



量子化学計算を用いたタンパク質の設計

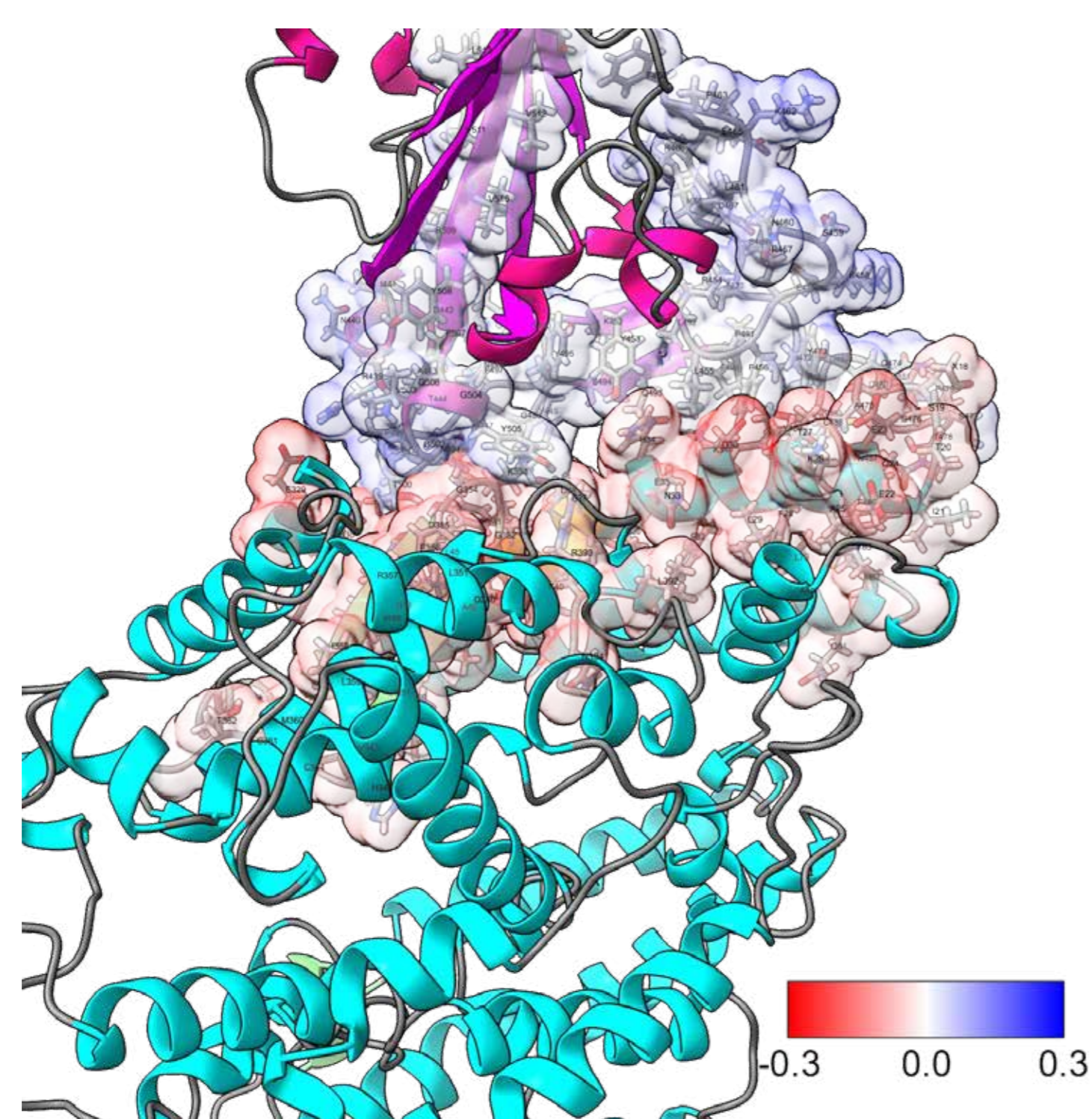


Protein Design Using Quantum Chemical Calculation

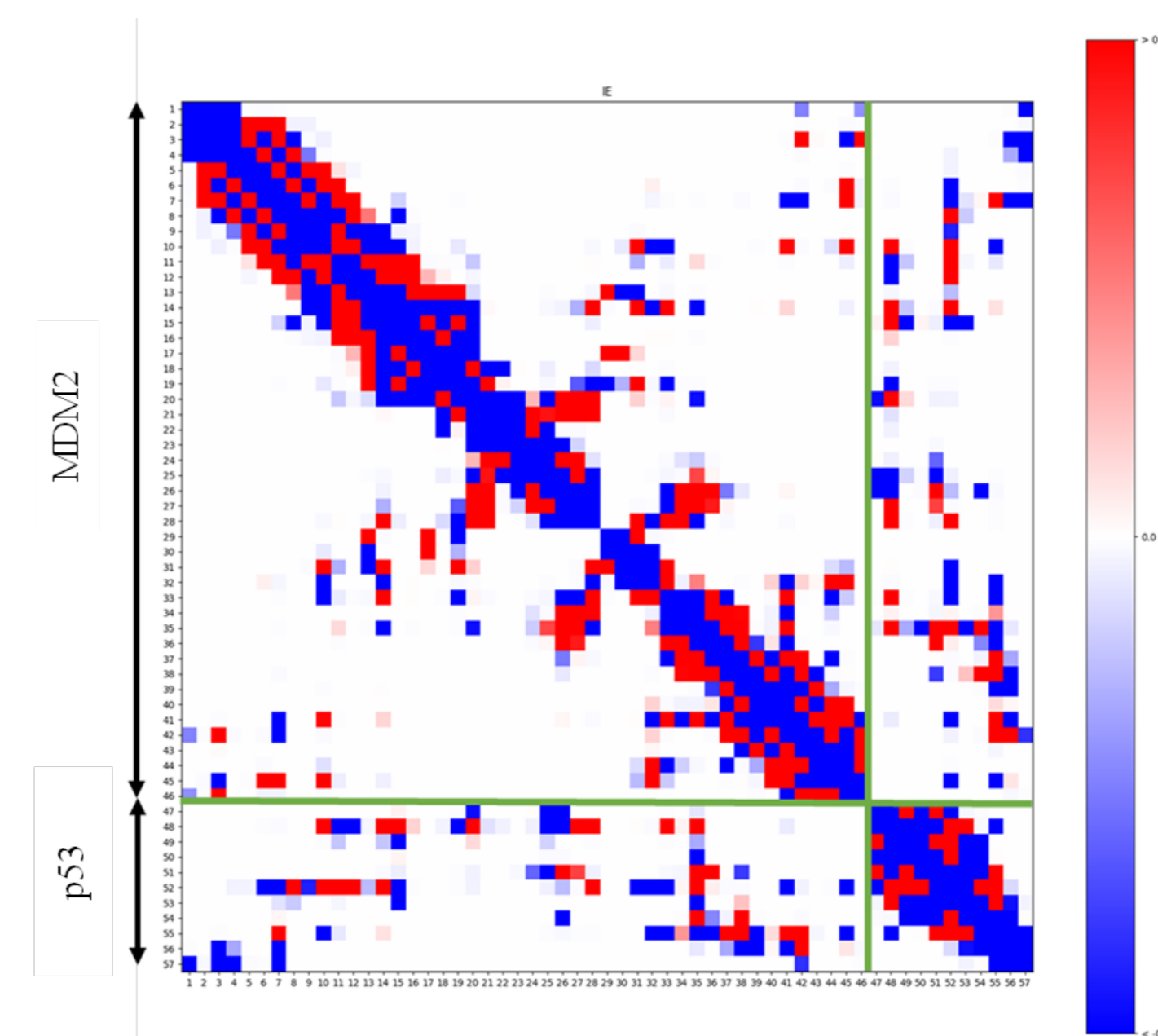
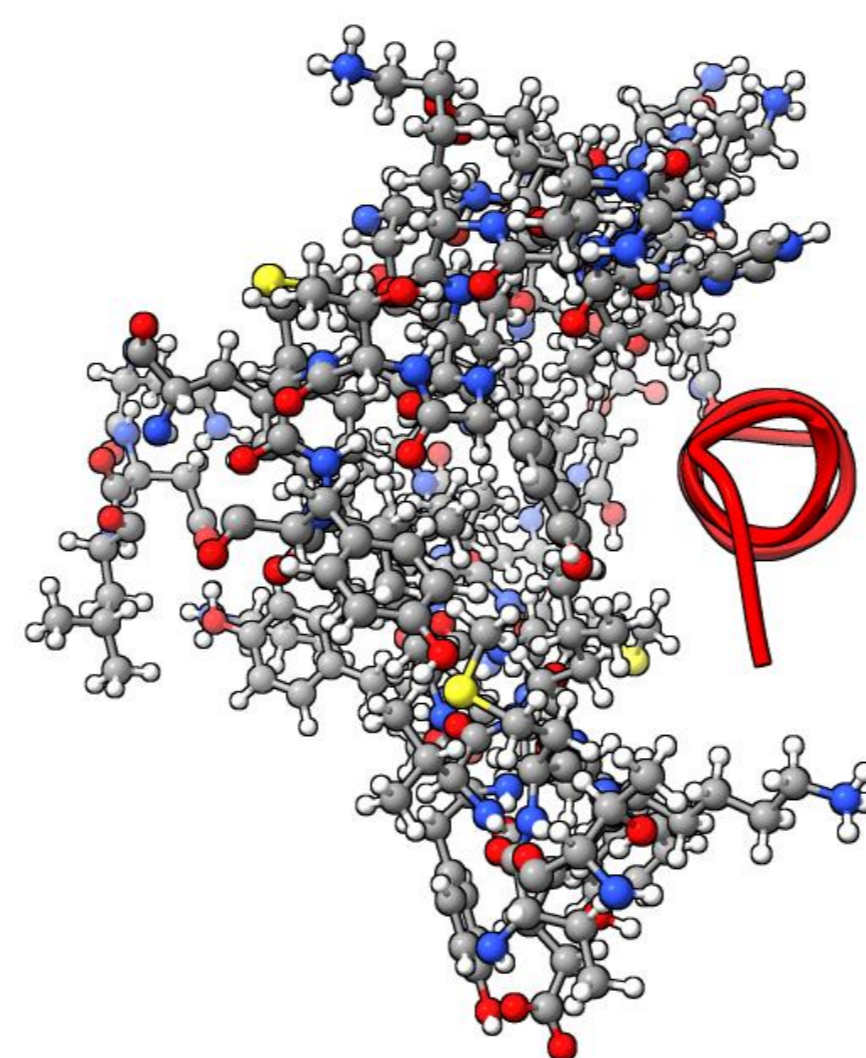
タンパク質の全ての正準分子軌道が計算できるソフトウェア“ProteinDF/QCLObot”を開発

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

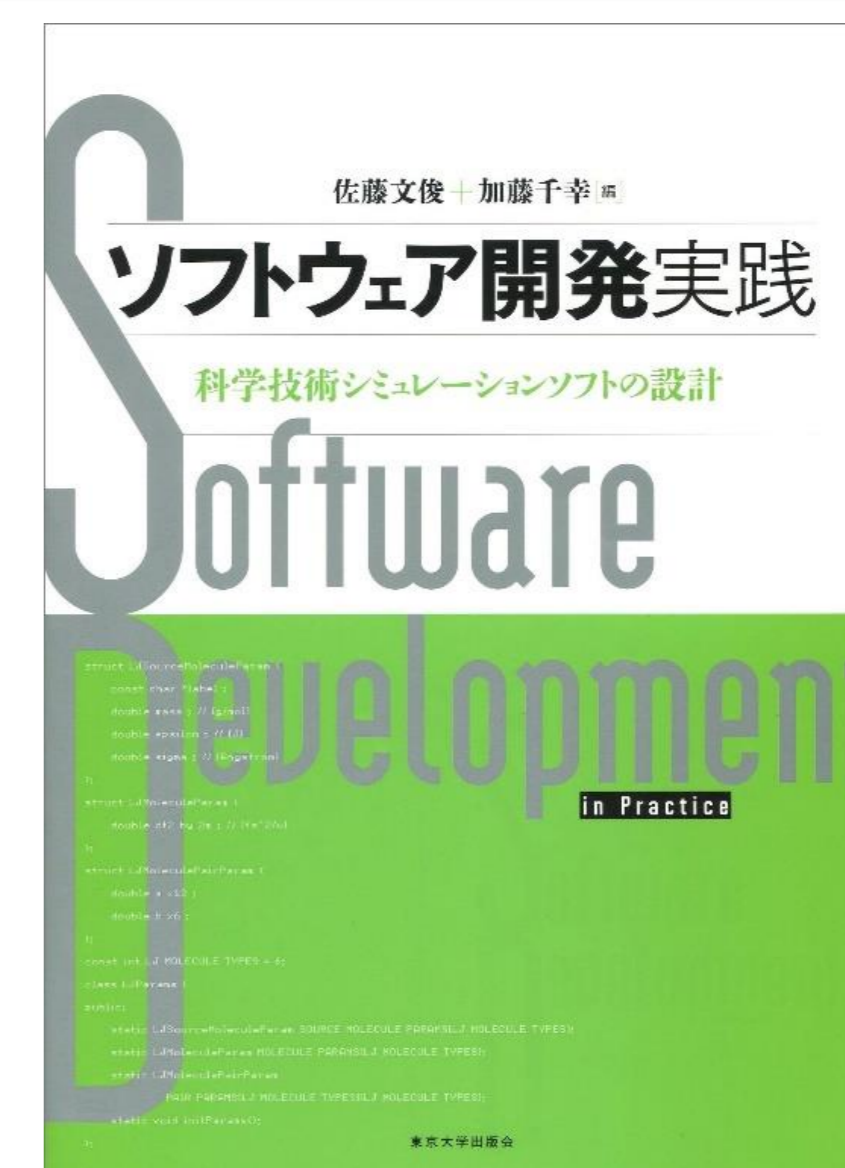
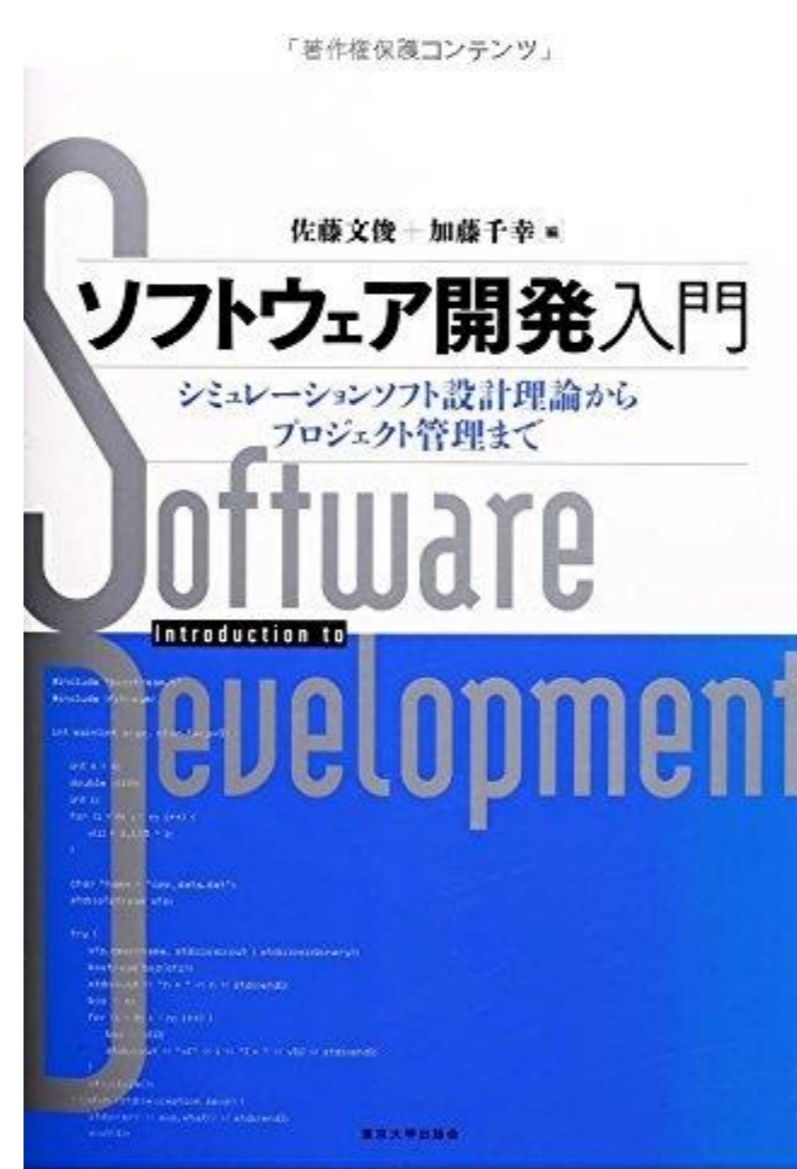
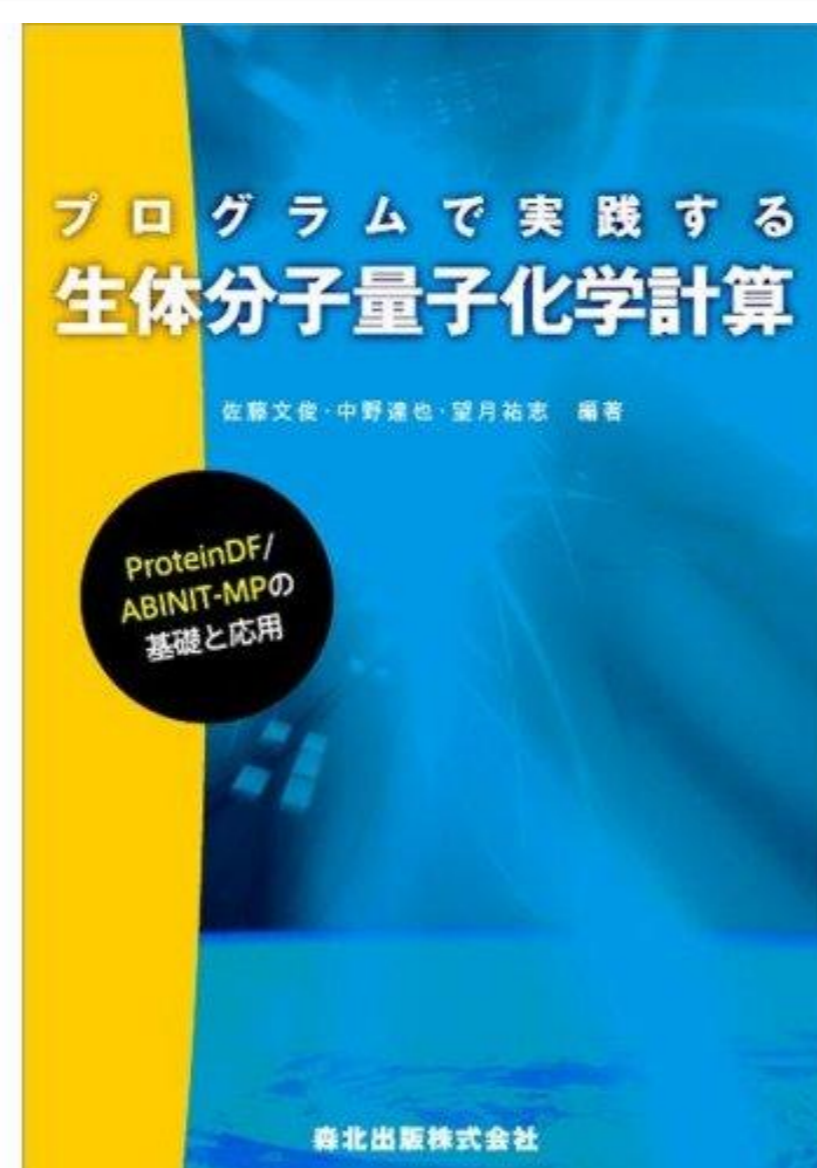
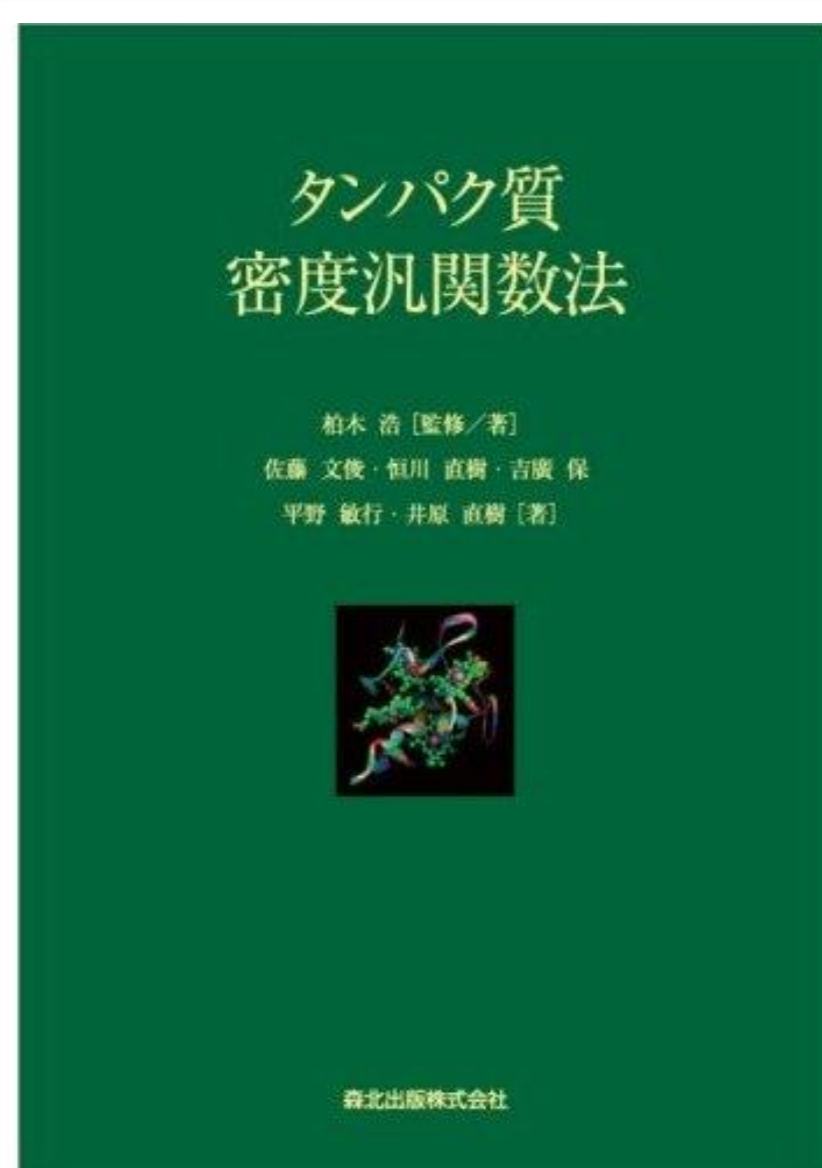
これらを用いてタンパク質の電子状態解析・設計を行っています



SARS-CoV-2ウイルススパイクタンパク質(上側)とACE2(下側)の結合領域における静電ポテンシャル分布



(左) p53-MDM2複合体モデルの構造
p53由来のペプチドを赤色で示した。
(右) 複合体モデルにおける相互作用エネルギーのヒートマップ



各種教科書あり☑

