

# 佐藤（文）研究室

## 量子・タンパク質の革新的なシミュレーション

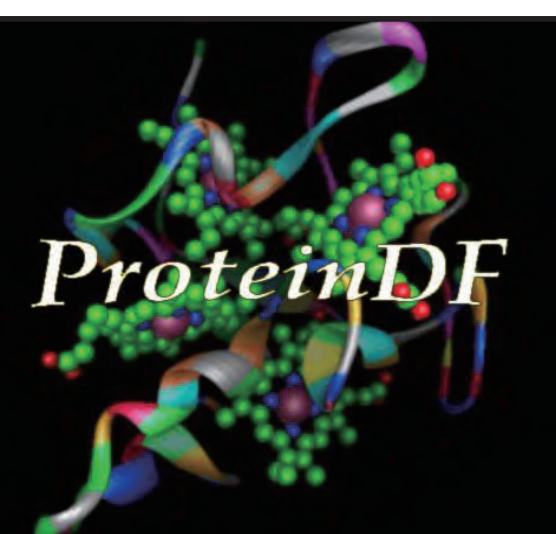


革新的シミュレーション研究センター  
機械・生体系部門

計算生体分子科学

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

工学系研究科 機械工学専攻

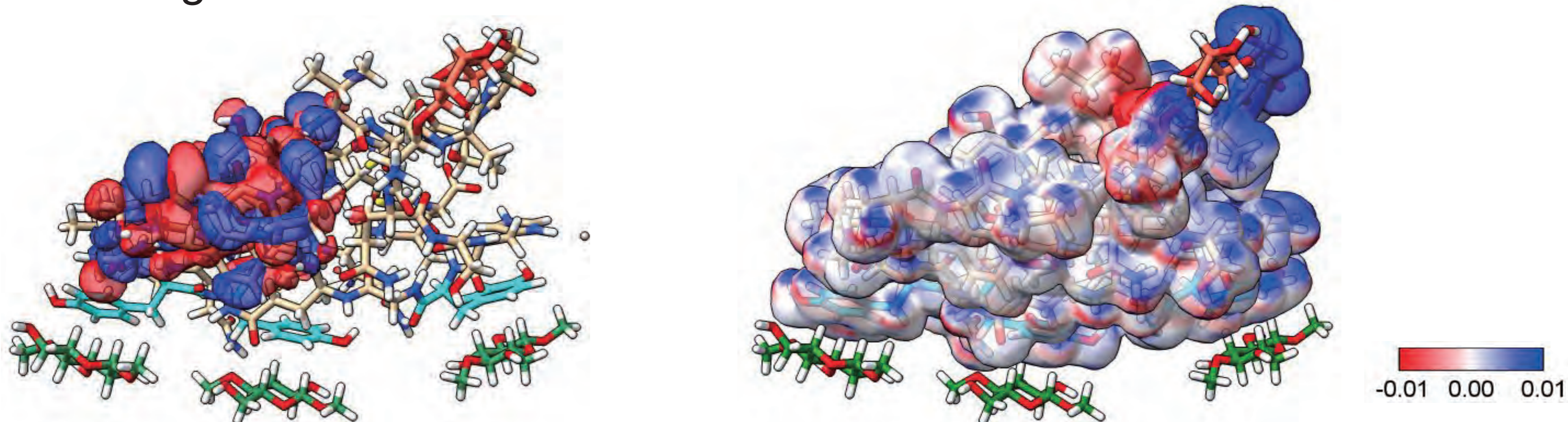


### 量子とタンパク質



タンパク質の全ての正準分子軌道を計算するソフトウェア“ProteinDF/QCLObot”を開発

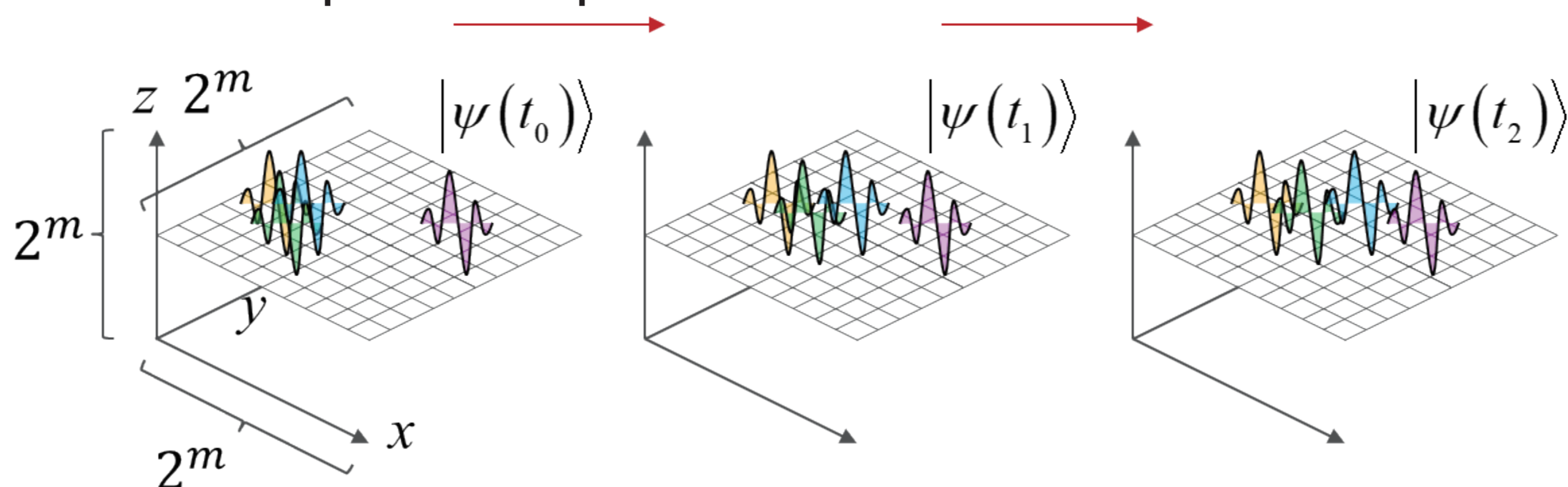
- ・タンパク質の電子状態解析・設計
- ・ <https://proteindf.github.io/>



(左) Thr1がO-マンノシル化されたセルラーゼ炭水化物結合モジュール(CBM)の分子軌道  
(右) Thr1のO-マンノシル化によるCBMの静電ポテンシャルの変化

量子コンピュータ上で動く化学反応シミュレータを開発

- ・量子コンピュータの能力を最大限利活用する第1量子化法
- ・ <https://github.com/crsq-dev/crsq-main>



化学反応シミュレータ：(左) 反応物, (中) 遷移状態, (右) 生成物



教科書あり☑

