

岡山理科大学直島好伸研究室・キヤノン株式会社

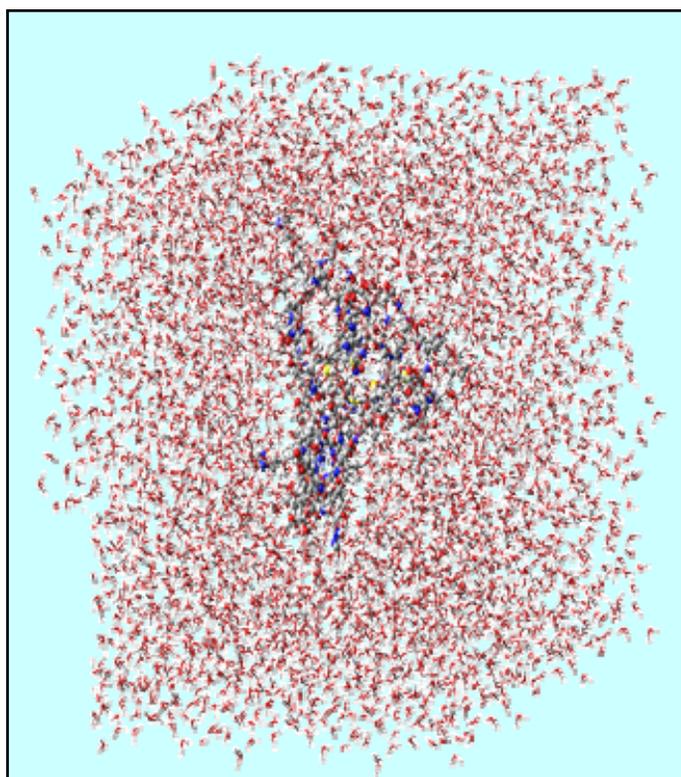
タンパク質の構造変化に関する分子計算 : 温度上昇時のコンピュータシミュレーション

Keywords : タンパク質、医薬、生命分子計算、量子化学計算、バイオテクノロジー

- ◆ 21世紀の次世代型研究は、従来の理論、実験の知識や技術に関する深い理解と共に、コンピュータシミュレーションの手法を用いることが必要不可欠である。コンピュータシミュレーションは、コンピュータによって自然現象を記述する方程式を解くことであり、現在、大学などにおける研究開発のみならず、産業界のあらゆる分野、特に、バイオ、ナノテクノロジーといった先端的分野において、わが国の産業競争力の基幹となる重要な科学技術であると言われている。
- ◆ 本共同研究は、“学”が持つコンピュータシミュレーション技術を用いてタンパク質の熱的変化における構造の特性や機能を解明し、その原理・原則を理解することに加え、“産”が持つ生産、製品に関するテクノロジーを活用して、生命本来の機能を凌ぐ特性を有する物質、製品を創製することを目的としている。

計算シミュレーションの手順

1. 分子力学計算によるタンパク質や化学物質の構造の調整
2. 分子動力学計算によるタンパク質の構造変化の追跡
3. 全電子量子化学計算によるタンパク質と化学物質の相互作用の解析



水中でのタンパク質の構造変化シミュレーション
設定温度: 300K ~ 400K ~ 500K ~ 600K

