

岡山理科大学直島好伸研究室・キヤノン株式会社

インスリンの構造変化に関する分子計算 :量子化学計算での温度上昇時の評価

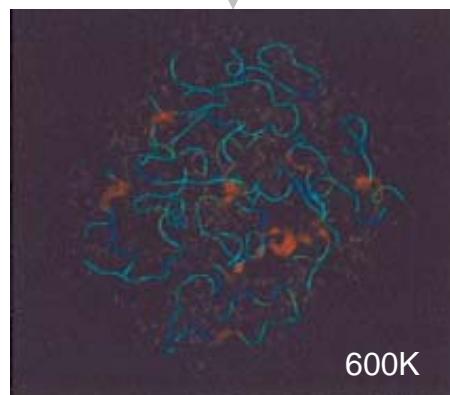
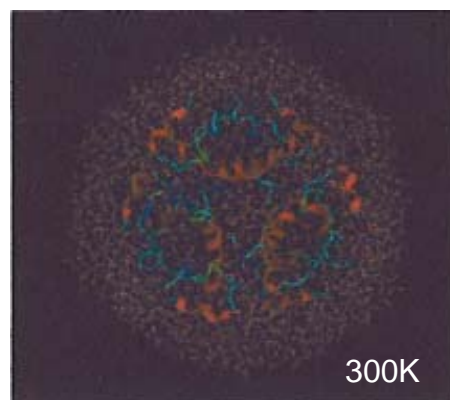
Keywords : タンパク質・分子構造・医薬・量子化学計算・バイオテクノロジー・シミュレーション

◆ 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、実験や製造を想定して工程数を低減するだけでなく、観察、実験が困難な自然現象を解析することができ、大学や企業のあらゆる分野、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、わが国の国際的な産業競争力の基幹となる重要な科学技術である。

◆ 本共同研究は、コンピュータシミュレーション技術を用いて生理活性を有するタンパク質の熱的変化時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、生産、製品に関するテクノロジーを相乗的に活用して、革新的な機能を有する物質や高付加価値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
およびタンパク質の構造変化の解析



インスリンの構造変化シミュレーション

