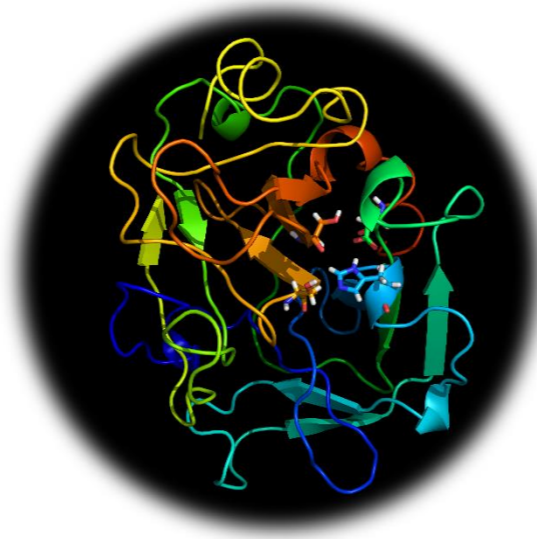
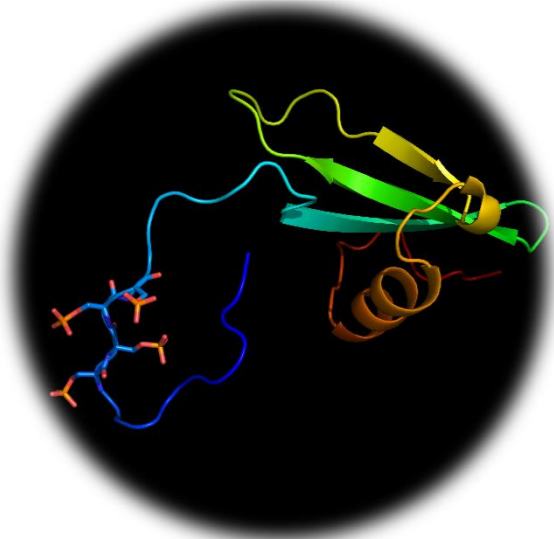


分子シミュレーションによる 蛋白質の動的挙動の解析

[技術の概要]

- ・水中の全原子分子動力学(MD)シミュレーションによる動的挙動・構造安定性の詳細な解析
- ・粗視化(CG)モデルを用いたMDシミュレーション、基準振動解析(NMA)による動的挙動の高速計算
- ・蛋白質ドッキングシミュレーションによる複合体構造予測
- ・線形応答理論(LRT)を用いた、外部刺激による構造変化の予測



[技術の利用例]

- ・変異による動的挙動・構造安定性への影響の解析
 - ・翻訳後修飾やプロトン化が動的挙動・構造安定性に与える影響の解析
 - ・天然変性蛋白質(IDP)の構造分布の解析
 - ・蛋白質複合体構造予測
 - ・リガンド結合などの外部刺激による構造変化の予測
- etc.

連絡先

[所属] 東北大学大学院・情報科学分野
生命情報システム科学分野

[名前] 木下賢吾

[E-mail] kengo@ecei.tohoku.ac.jp