



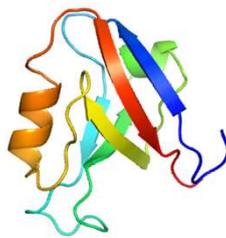
生体高分子の動的相関量解析方法

キーワード

タンパク質、計算科学シミュレーション、酵素機能、創薬、生命科学

【研究内容の概要】

タンパク質内部や分子間のアミノ酸側鎖間の相関関係を調べる新手法を開発しました。



MDデータ

分子動力学 (MD) データ作成

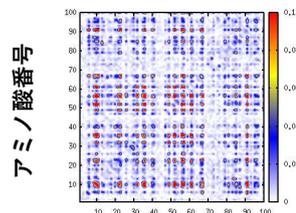
時間依存
距離情報

アミノ酸側鎖 (Residue) 毎の
時間依存性原子間距離情報に変換

アミノ酸A

アミノ酸B

アミノ酸側鎖内距離情報の
相互情報量計算



アミノ酸側鎖間のマップ (2次元図)
「タンパク質内アミノ酸の動的相関関係」を明確に視覚化

特徴/効果	<ul style="list-style-type: none"> 従来の方法では実現できなかったアミノ酸間の相関関係を精密評価 計算科学との連携で高速にタンパク質の性質を評価可能 どのようなタンパク質にも適用可能 アロステリック効果を効果的に抽出し創薬等に貢献
利用/用途	<ul style="list-style-type: none"> タンパク質の人工的改変 アロステリック創薬 タンパク質物性の評価と理解 新規酵素作成

知的財産権等情報		先端技術総合研究所		米澤 康滋
特許出願	特願2020-217087	URL	研究詳細 https://www.kindai.ac.jp/bost/research-and-education/teachers/introduce/detail.php?html=yonezawa-yasushige-132	
論文等	1編			

連絡先：近畿大学 リエゾンセンター(KLC)
 〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1 E-mail : klc@kindai.ac.jp
 TEL : 06-4307-3099 FAX : 06-6721-2356 URL : <http://www.kindai.ac.jp/liaison/>