

タンパク質結晶の品質改善及びDNA配列に依存した動構造解析

[技術の概要]

1. タンパク質結晶の品質改善とパッキング改変

構造エネルギー計算にもとづき、結晶内分子パッキングを安定化及び、不安定化している残基を推定します。その部分に変異を入れることによって結晶の分子パッキングの安定性を大きく変える残基を推定することにより、結晶の品質改善及び分子パッキング改変を提案します。

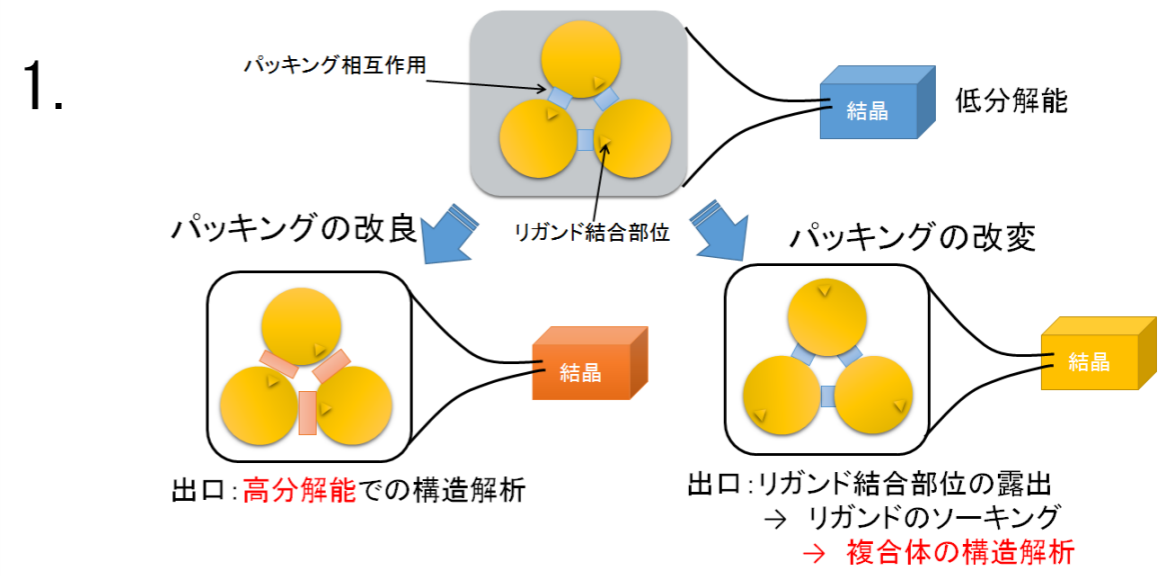
2. 塩基配列依存的な構造・ダイナミクス解析

構造インフォマティクス、機械学習、分子動力学計算を駆使して、DNAの配列に依存した構造・ダイナミクス特性の解析結果を提供します。

支援に供する設備

日本原子力研究開発機構・関西光科学研究所にある計算機クラスター

[技術の利用例]



連絡先

[所属] 日本原子力研究開発機構
 [名前] 河野秀俊
 [E-mail] kono.hidetoshi@jaea.go.jp