

研究タイトル：

## 複雑系のコンピュータ解析



氏名： 西山 勝彦 / NISHIYAMA Katsuhiko

E-mail: nishiyama@tsuruoka-nct.ac.jp

職名： 准教授

学位： 博士(工学)

所属学会・協会： 応用物理学会

キーワード： シミュレーション、遺伝的プログラミング、バイオ、ナノ

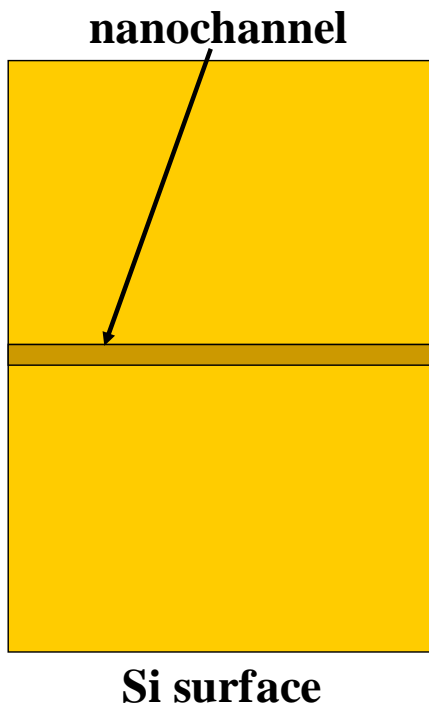
技術相談

提供可能技術：

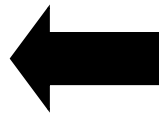
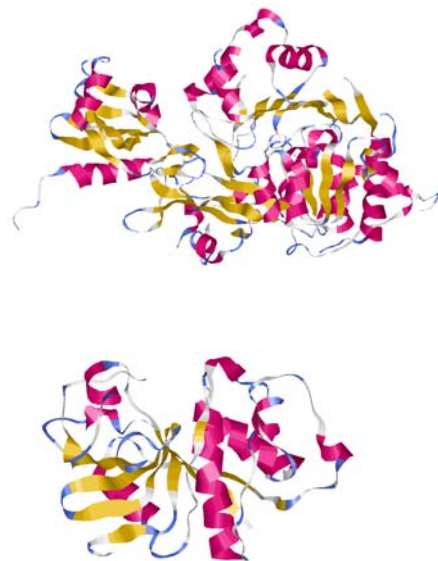
- ・タンパク質の分子動力学シミュレーション
- ・タンパク質-リガンド間ドッキングシミュレーション
- ・タンパク質-リガンド間結合特性のモデリング

### 研究内容： ナノ構造によるタンパク質機能制御

半導体微細加工技術の発展は、ナノスケールにおいて凹凸形状の作成及び疎水、親水性状の制御を可能にした。一方、タンパク質の表面には、ナノスケールで形状、性状の異なる領域が存在することが知られている。この微細加工技術によりナノ加工された半導体表面をタンパク質に接触させ、タンパク質の構造、挙動を制御し、タンパク質の機能を改変するということが本研究の目的である。タンパク質は、元来医学、工学分野で広く利用されており、その機能を改変出来れば更に応用範囲は広がるものと期待される。ここでは、その特性をコンピュータシミュレーション、人工知能(遺伝的プログラミング)を用いて解析する。



タンパク質



### 提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	
パソコン	DELL
ソフトウェア AMBER	UCSF

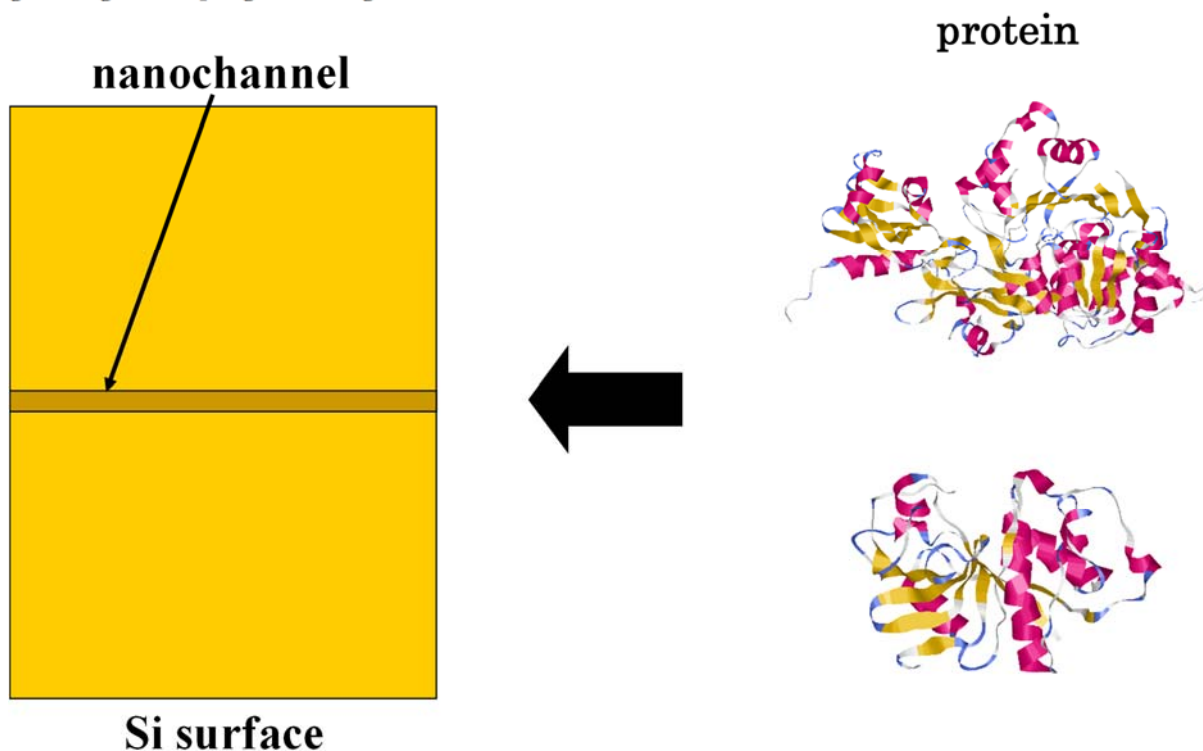
# Computational analysis of complex systems



<b>Name</b>	NISHIYAMA Katsuhiko	<b>E-mail</b>	nisiyama@tsuruoka-nct.ac.jp
<b>Status</b>	associate professor		
<b>Affiliations</b>	The japan society of applied physics		
<b>Keywords</b>	simulation, genetic programming, biotechnology, nanotechnology		
<b>Technical Support Skills</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• molecular dynamics simulation of protein</li> <li>• docking simulation between protein and ligand</li> <li>• modeling of binding behavior between protein and ligand</li> </ul>		

## Research Contents **Modification of protein function by adsorption on nanostructure**

Current Si processing technology enables us to fabricate nanostructured arrays on Si surfaces. Delicate control of the surface conditions of Si, such as the hydrophobic or hydrophilic properties, is also possible because of recent progress in wet-treatment technology. Therefore, a Si surface with a nano-fabricated, wet-treated array may able to modify the structure of proteins to give them specific, desired functions. There is great potential for biomedical applications based on proteins with tailored functions created on a properly designed solid surface. Here we analyze the properties by using computer simulations and artificial intelligence (genetic programming).



### Available Facilities and Equipment

PC	DELL
Software AMBER	UCSF