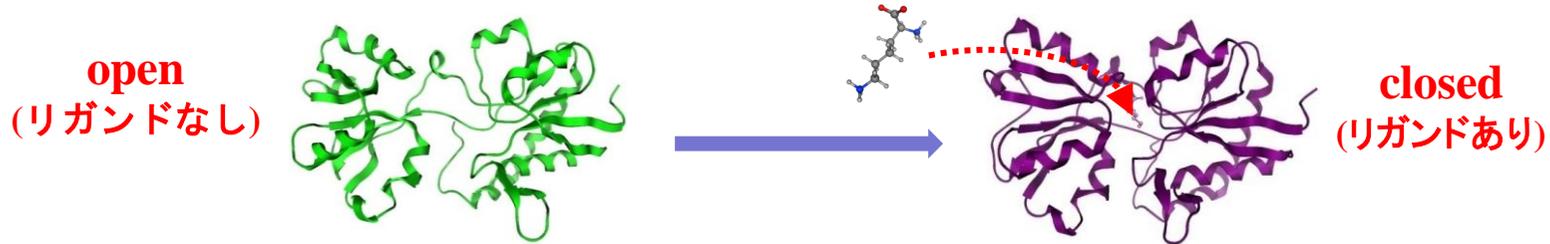


- タンパク質の構造変化はどのようにおこるのか？

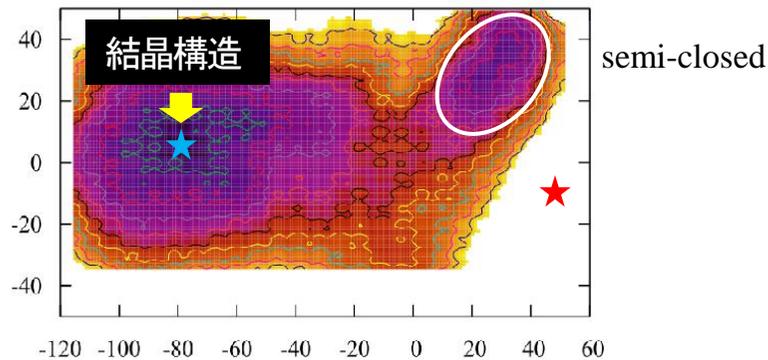


- ターゲットは2種類のタンパク質
- “リガンドあり”と“リガンドなし”での自由エネルギー地形を計算

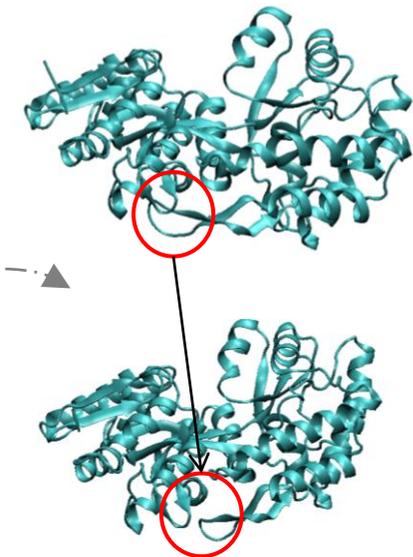
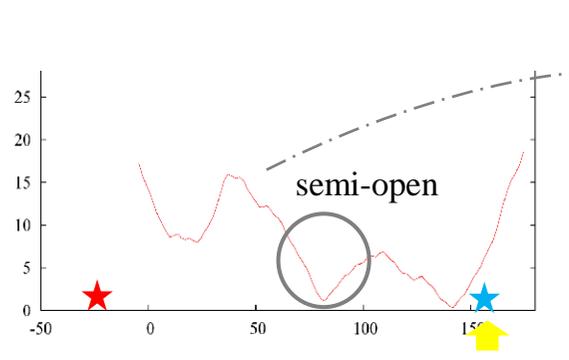


- リガンドがある場合：結晶構造付近 (closed) が圧倒的に安定
- リガンドがない場合：結晶構造以外にも安定な構造あり

タンパク① (リガンドなし)



タンパク② (リガンドなし)



- ★ リガンドなし
- ★ リガンドあり

安定状態と準安定状態の間を揺らいでいる？

結晶構造