## 等温滴定熱測定データ解析システムの 改良と機能拡張

小松研究室 182C3023 上田直利



## 研究目的

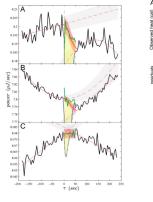
高精度のデータ解析が簡便にできるシステムを作成する。

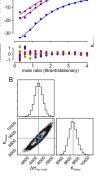
## 問題点

ピーク解析 ・ベースライン フィッテイング ・データに影響を 受ける



特異値分解 原理をソフトウェアに



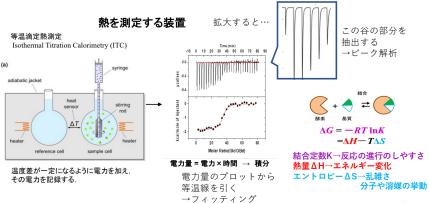


High-precision isothermal titration calorimetry with automated peak-shape analysis
Sandro Keller 1, Carolyn Vargas, Huaying Zhao, Grzegorz Piszczek, Chad A Brautigam, Peter Schuck, Anal. Chem. 2012, 84,
5066-5073

pytc: Open-Source Python Software for Global Analyses of Isothermal Titration Calorimetry Data Hiranmayi Duvvuri, Lucas C. Wheeler, and Michael J. Harms Biochemistry 2018, 57, 2578 – 2583



## 等温滴定熱測定(ITC)について



Thermodynamics of protein-ligand interactions as a reference for computational analysis: how to assess accuracy, reliability and relevance of experimental data Krimmer S.G and Klebe G. J. Comput. Aided Mol. Des. (2015) 29, 867–883

