

課題名 (タイトル) :

長時間分子動力学シミュレーションのデータ解析プログラムの開発と応用

利用者氏名 : 小山洋平

理研での所属研究室名 : 生命システム研究センター 計算分子設計研究グループ

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

所属研究室で開発が行われている分子動力学専用計算機 MDGRAPE-4A では長時間の分子動力学シミュレーションが可能になる予定である。それにともない大量に得られる構造データを解析するためのプログラムの開発や応用を行う。

2. 利用がなかった場合の理由

本年度は MDGRAPE-4A で実装するクーロン力の計算手法の検討やテストを行うことになり、開発環境の関係で研究室内の計算機を利用することが必須であったため、HOKUSAI の利用がなかった。

平成 29 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Temperature-Sensitive Substrate and Product Binding Underlie Temperature-Compensated Phosphorylation in the Clock.

Yuta Shinohara, Yohei M. Koyama, Maki Ukai-Tadenuma, Takatsugu Hirokawa, Masaki Kikuchi, Rikuhiko G. Yamada, Hideki Ukai, Hiroshi Fujishima, Takashi Umehara, Kazuki Tainaka, and Hiroki R. Ueda.

Molecular Cell 67, 783-798 (2017).

【その他（プレスリリース、学術会議以外の一般向けの講演など）】

http://www.riken.jp/pr/press/2017/20170908_1/

2017 年 9 月 8 日

理化学研究所

体内時計が温度に依存しない仕組みを原子レベルで解明

—リン酸化酵素内に温度依存的なブレーキを発見—