

課題名(タイトル): バイオ表面の水和シミュレーション

利用者氏名: 田中 信行

理研における所属研究室名: 生命機能科学研究センター 集積バイオデバイス研究チーム

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
申請者は、独自技術であるバイオ界面の濡れ性評価手法について、研究を実施している。最近この独自技術を用いて計測した評価指標と物質界面の水和状態との間に相関が見られた。本簡易利用においては、分子動力学シミュレーションソフト gromacs を用いて、種々の界面における水和状態の傾向を調査することを目的としている。水和状態の傾向を知ることにより、独自技術がどのようなメカニズムで物質界面の水和状態を捉えているのかを予測できる可能性がある。
2. 具体的な利用内容、計算方法
課題の利用期間中に計算を実行しなかった。
3. 結果
特になし。
4. まとめ
特になし。
5. 今後の計画・展望
スーパーコンピュータ利用の中止を検討している。
6. 利用がなかった場合の理由
種々の界面における水和状態を、適切にモデル化することができなかったため。

2020年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

特になし。

【会議の予稿集】

特になし。

【口頭発表】

特になし。

【ポスター発表】

特になし。

【その他(著書、プレスリリースなど)】

特になし。