

プロジェクト名(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

理研における所属研究室名:

生命機能科学研究センター 計算分子設計研究チーム

---

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

タンパク質や DNA などの生体高分子の数マイクロ秒に及ぶ分子動力学シミュレーションが可能になってきている。マイクロ秒オーダーでは平均構造付近の構造ゆらぎだけではなく、アミノ酸の主鎖や側鎖の二面角変化などのより複雑な構造変化が生じるため、このような複雑な構造変化からタンパク質の機能を理解するための手法の開発や応用を行う。

2. 利用がなかった場合の理由

本年度は所属研究室での計算資源で足りたため、利用が無かった。