

プロジェクト名(タイトル):MDによる創薬研究

利用者氏名:宮武 秀行

理研における所属研究室名:伊藤ナノ医工学研究室

---

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

MDシミュレーションによる創薬研究を検討した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Molsoft ICMによる計算を検討したが、スパコン用のライセンスが高額であることが判明し、断念した。また、無償ソフトであるVMD/NAMDの使用も試みたが、インストールが複雑で実行できず、断念した。

3. 結果

スパコンによる計算結果は無し。

4. まとめ

スパコンによる計算結果は無し

5. 今後の計画・展望

本計算機システムは、申請者の力量では使いこなせないことが判明した。そのため、別のスパコンシステムの利用を検討する。

6. 利用がなかった場合の理由

本計算機システムを使いこなせなかったため