
分子科学研究所
計算分子科学研究所
斉藤グループ 夏の体験入学

教授： 斉藤 真司

助手： 金 鋼

研究員： 小林 千草

矢ヶ崎 琢磨

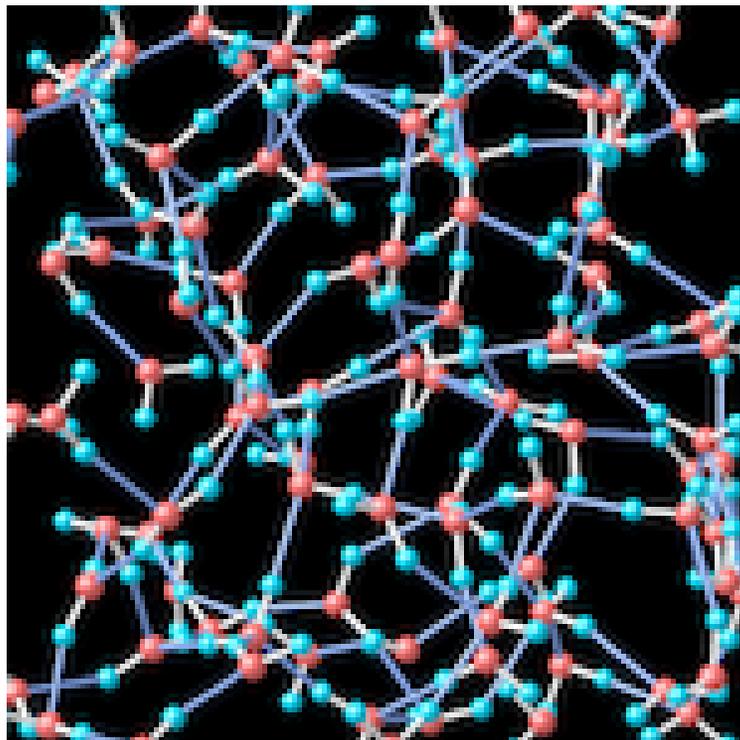
研究目的

溶液や生体系においてさまざまな空間・時間スケールで起こるダイナミックな変化の様相、起源を分子レベルから明らかにする

- キーワード
 - 統計力学
 - 量子力学
 - 多次元分光
 - 分子シミュレーション

研究例1

液体、過冷却液体、相転移過程におけるダイナミクスと揺らぎ



液体状態の水の構造

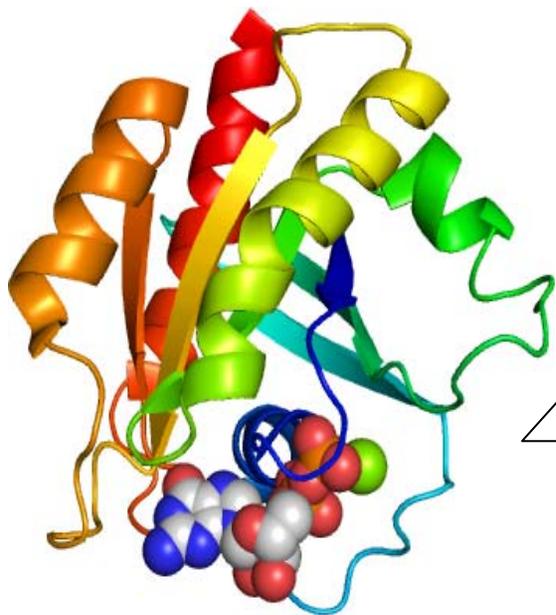
研究例2

生体高分子の構造変化ダイナミクス

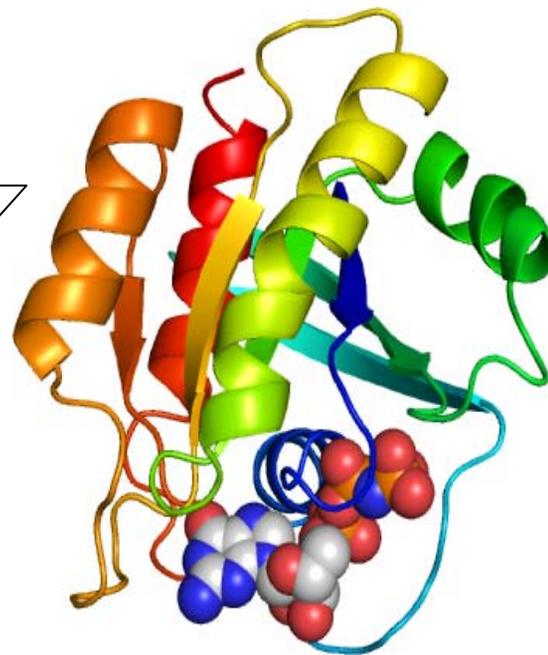
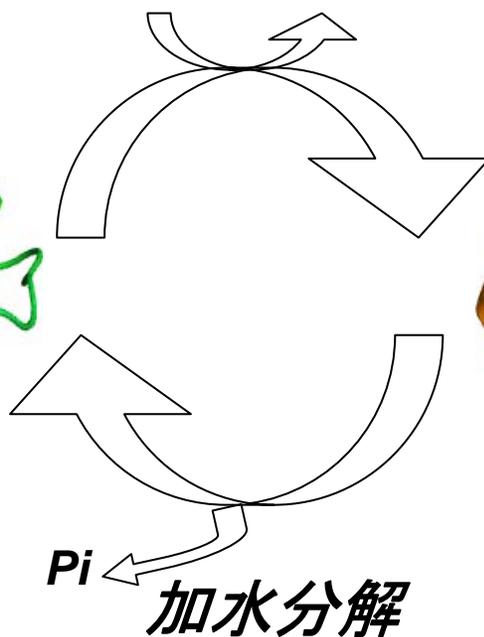
交換反応

GTP

GDP



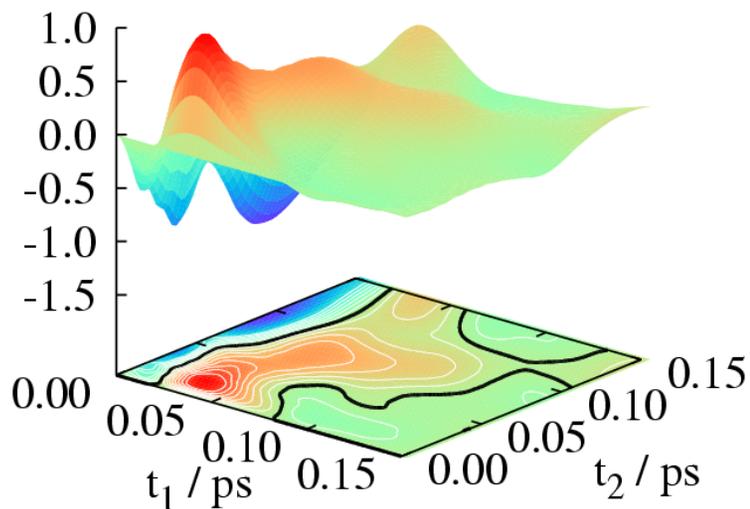
GDP結合Rasタンパク質



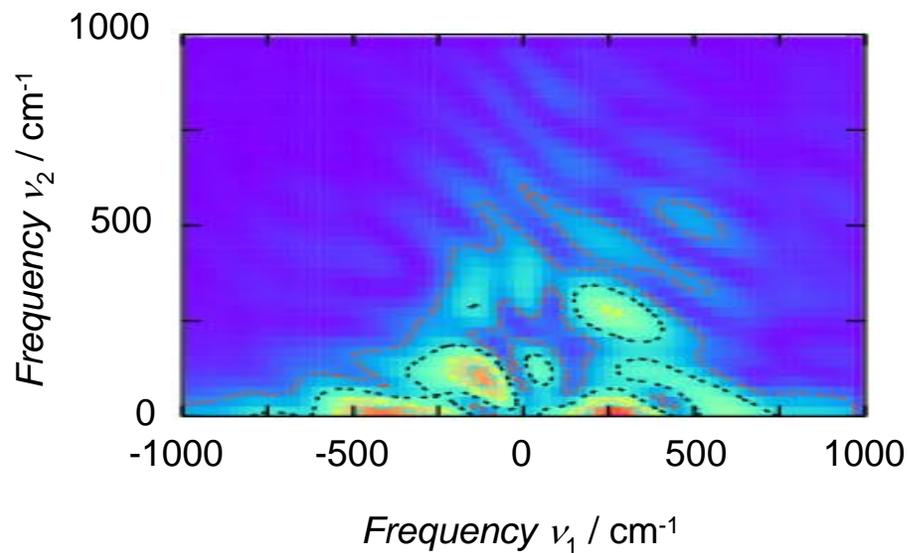
GTP結合Rasタンパク質

研究例3

多次元分光法など凝縮系ダイナミクス解析手法の開発



水の2次元ラマンシグナル



水の2次元ラマンスペクトル

体験入学プログラム

- 分子動力学シミュレーションにさわってみよう
- 計算プログラムを動かしてみよう
 - 単原子分子モデルの分子シミュレーション
- 結果の解析と可視化をしよう
 - 動径分布関数
 - 平均二乗変位
 - etc...
- どんな研究ができるか考えてみよう

