

---

分子科学研究所  
計算分子科学研究系  
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

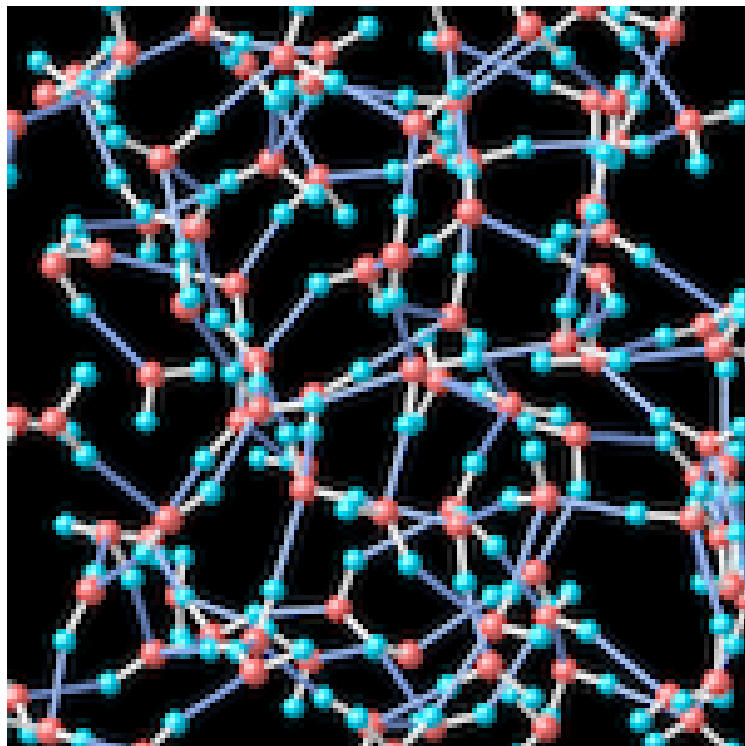
# 研究目的

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



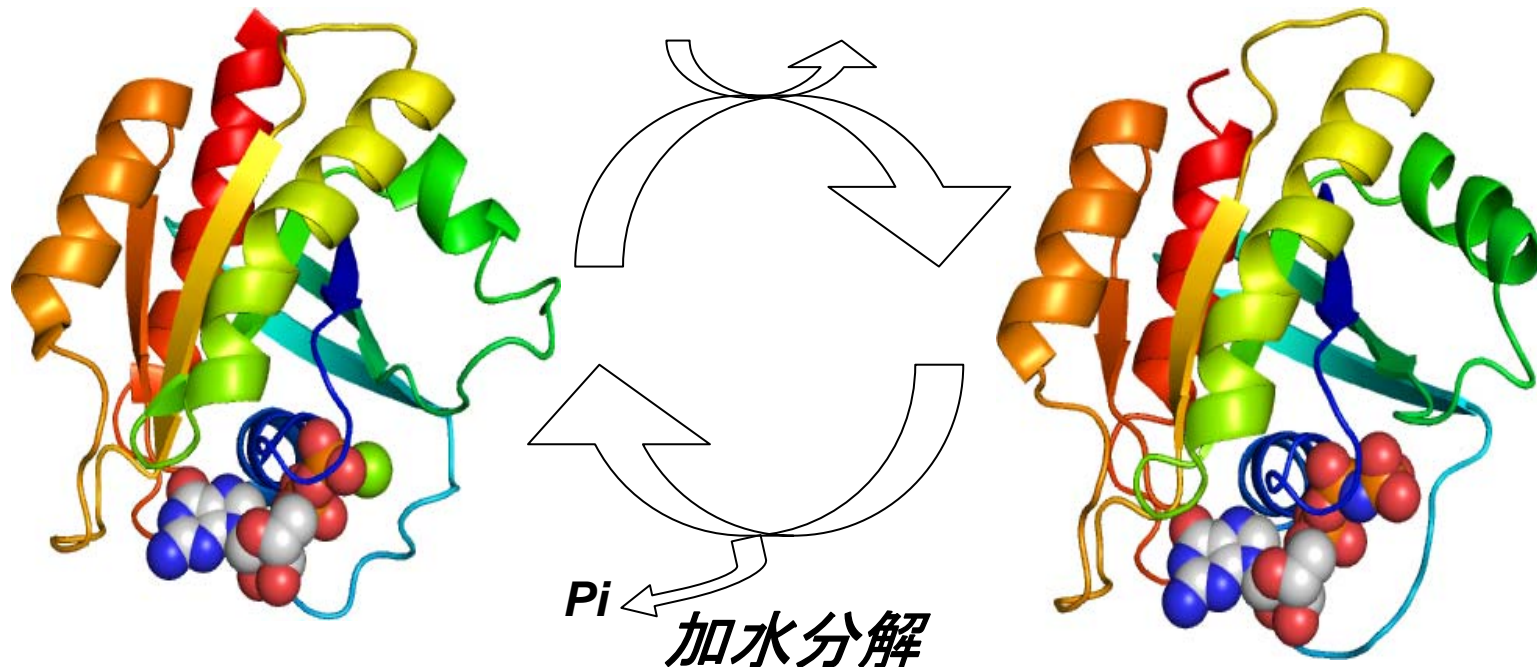
液体状態の水の構造

# 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

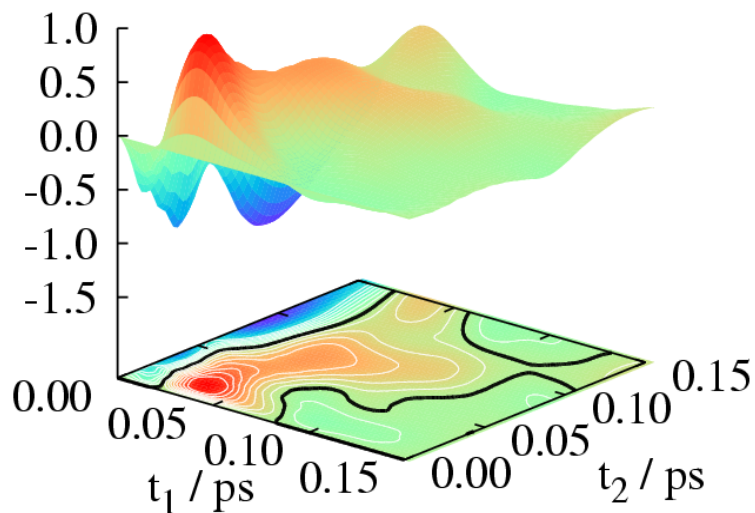


GDP結合Rasタンパク質

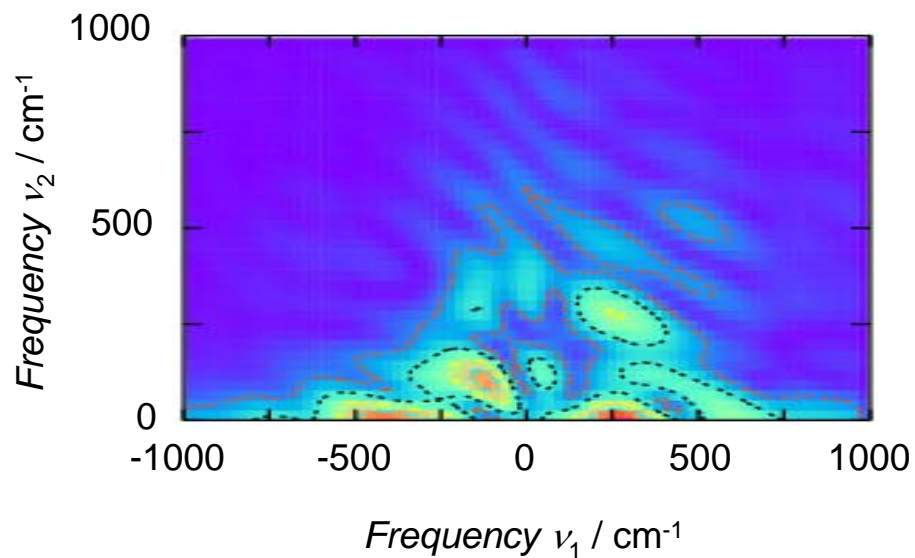
GTP結合Rasタンパク質

# 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

