

佐藤 信一郎

「全原子分子動力学シミュレーションと量子化学シミュレーション」

機関名・工学部・分子集積化学研究室 email: s-sato@eng.hokudai.ac.jp

TEL ex6607、研究室HP <http://cma.hucc.hokudai.ac.jp/>

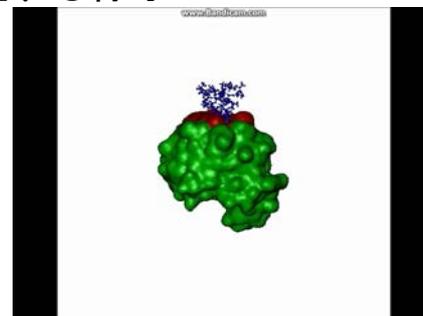
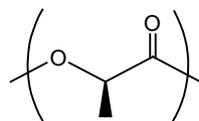
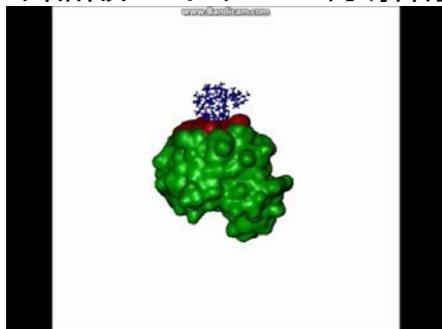
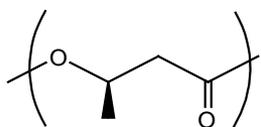
出身地 宮城県 趣味 ミリタリー(WWII専門)、将棋、スポーツ観戦

## 研究シーズ

- (1) 全原子古典分子動力学シミュレーション法でたんぱく質や高分子の熱力学的安定性や熱揺らぎについての見積もりができます
- (2) 全原子量子化学計算で可視紫外吸収、赤外ラマン、NMRシミュレーションが可能です。⇒ 分子構造、分子間相互作用等の詳細な知見が得られます。

全原子MDシミュレーションの例(田口・松本先生との共同研究)

(ポリ乳酸orポリ酪酸がポリマー分解酵素の疎水ドメインに接近する様子)



## <社会実装への可能性> (3点以内)

GPUボードの高性能化と廉価化により、従来は大型計算機が必須であった全原子MD計算が身近なパソコンレベルで実行可能になりつつある。生化学、有機化学、分子生物学、生命工学分野などでの各種経験則に対する理論的裏づけとなる根拠を与える可能性がある。