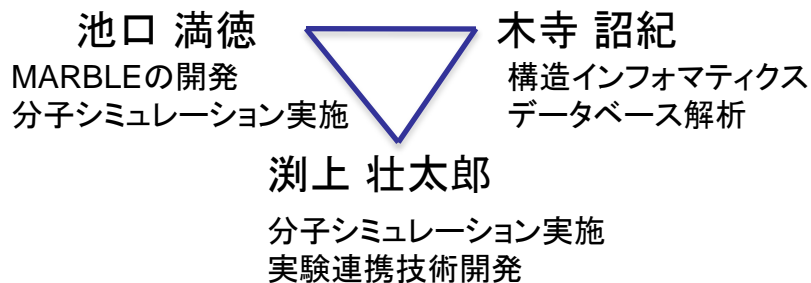


【課題概要】

分子動力学シミュレーションを中核として利用し、X線・中性子溶液散乱, NMR, 質量分析等, 各種構造生物学データを活用した生体分子構造機能解析により, 生物学, 創薬等の研究開発の支援, および, 方法論の高度化を図る

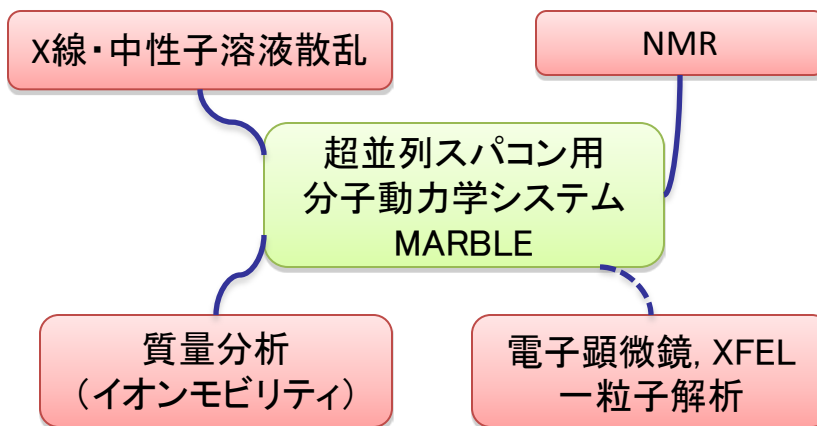
【運営体制】



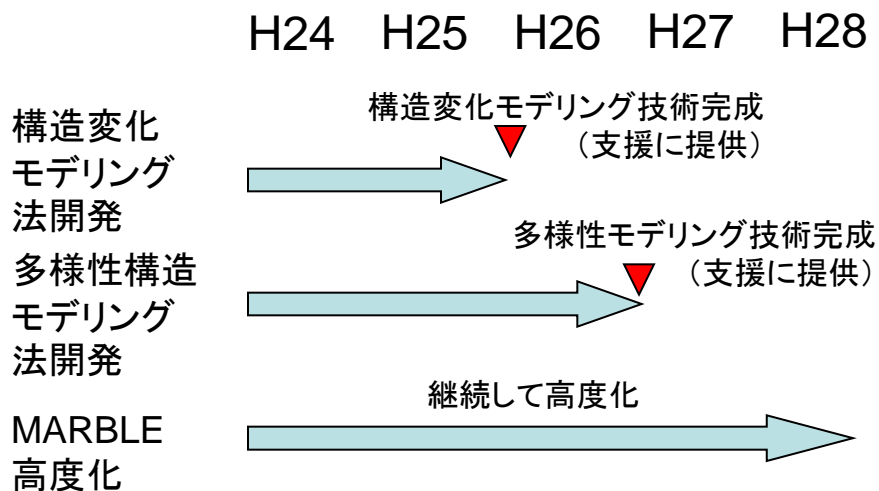
【連絡先】

横浜市立大学
池口満徳、045-508-7232、
ike@tsurumi.yokohama-cu.ac.jp

【支援に供する技術】

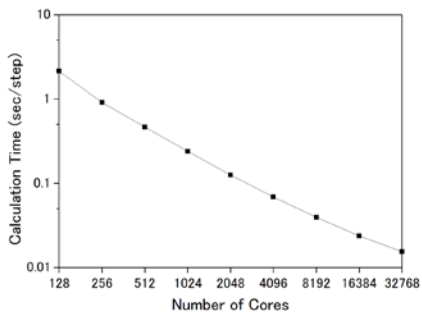


【高度化研究】

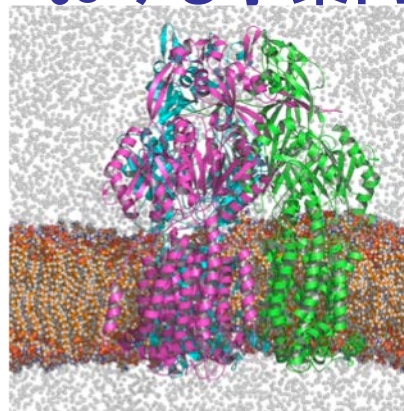


【これまでの研究実績と創薬等PFにおける事業内容】

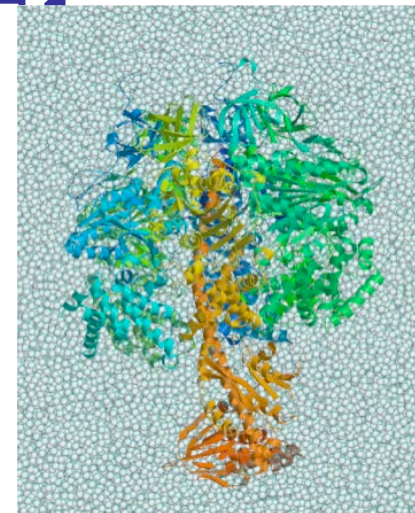
スパコン用分子動力学システムMARBLE



ライフ・グランドチャレンジ
プログラムにてスパコン
「京」用に最適化

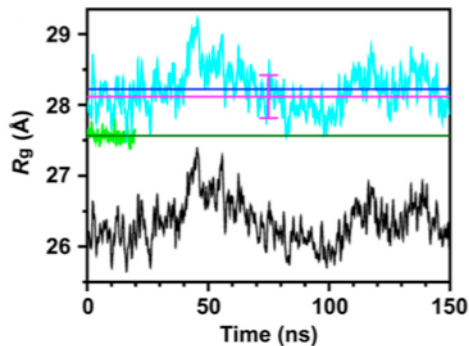
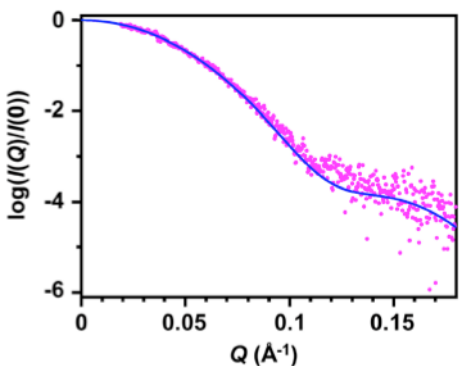


多剤排出トランスポーター
AcrB
(村上先生と共同研究)



F₁-ATPase
(野地先生らと共同研究)

MDとSAXSの連携 (MD-SAXS法)

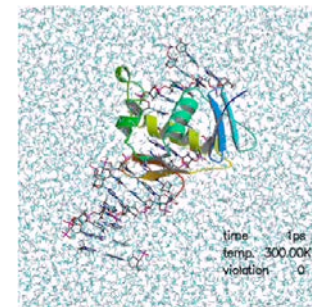
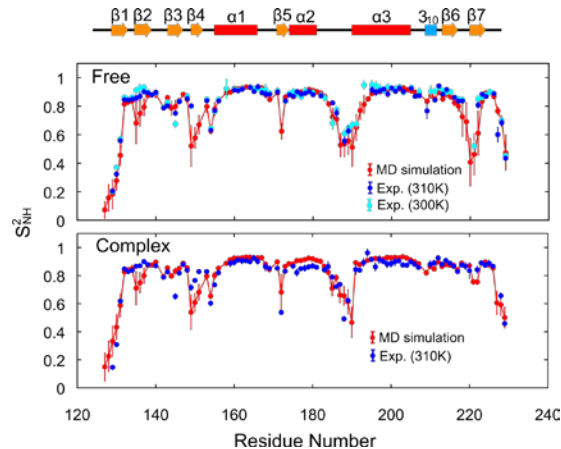


MD中ゆらぎ

Pink: 実験 Blue: 計算

佐藤衛先生 (横浜市大) と共同研究

MDとNMRの連携 (MD-NMR法)



NMRの揺らぎとMDの
揺らぎは一致

西村善文先生 (横浜市大) と共同研究