

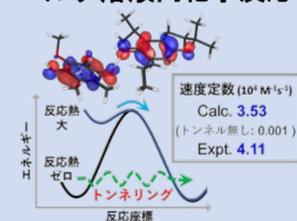
# 研究ユニット紹介：分子シミュレーション研究創発センター

- 分子シミュレーションを基盤に、学際連携や産学連携を通じて新領域を開拓し、科学技術の発展と産業応用を目指す卒業的な拠点です。

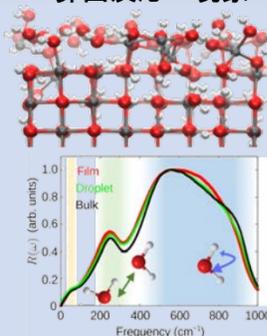
ユニット参加メンバー：（ユニット長）泰岡 顕治（副ユニット長）荒井 規允  
 渡辺 宙志、畑中 美穂、村松 眞由、彭 林玉、山本 詠士、稲垣 泰一、佐藤 碧海、浅井 誠(KGRI)、平野 秀典、Paul Brumby

## 量子化学計算

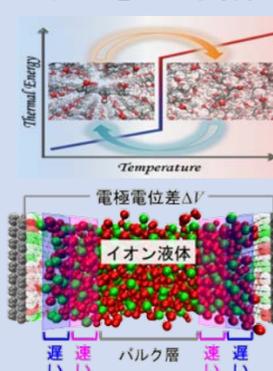
バルク溶液内化学反応



界面反応・現象



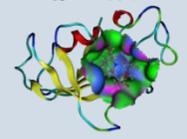
熱・電気化学特性



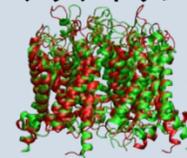
単糖の量子化学計算



タンパク質-リガンド相互作用

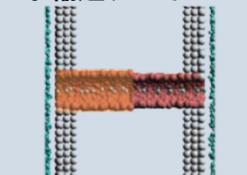


膜タンパク質アクアポリン

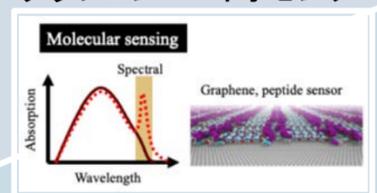


## 生体分野

水輸送ナノポンプ

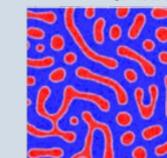
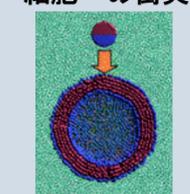


グラフェン・バイオセンサー



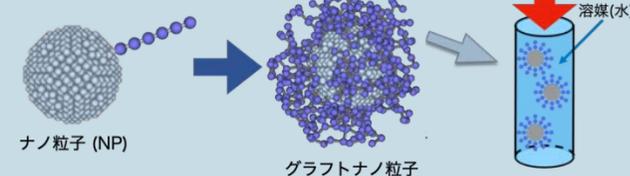
メソスケール細胞膜モデル

細胞への衝突



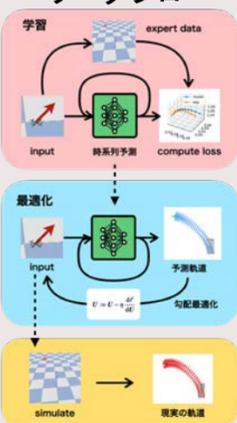
## 材料分野

グラフトナノ粒子のシミュレーション

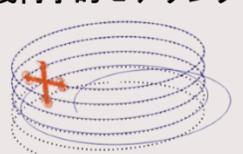


## 応用数学・数値計算法

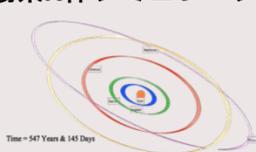
時系列データ解析  
ワークフロー



運動方程式の  
幾何学的モデリング

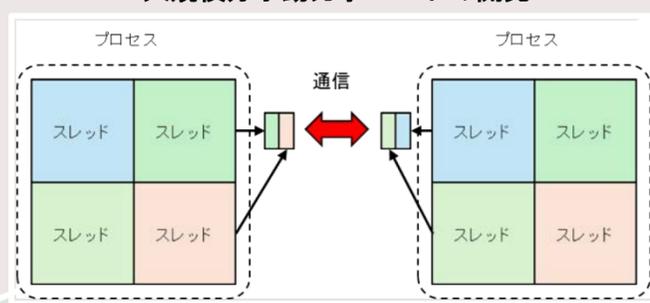


太陽系N体シミュレーション

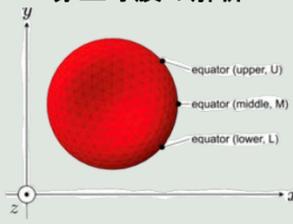


# 分子シミュレーション

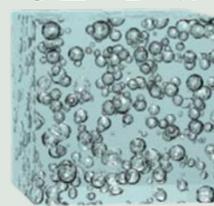
大規模分子動力学コードの開発



赤血球膜の解析

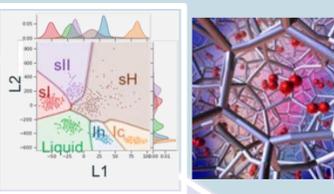


多重気泡生成

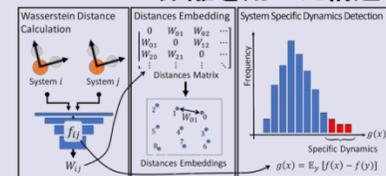


## スーパーコンピュータ

ハイドレートの構造分類



Wasserstein距離を用いた構造判別

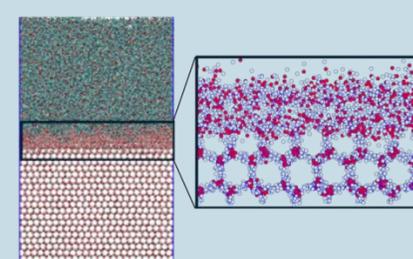


## 機械学習

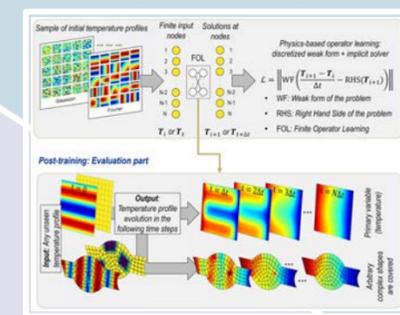
液晶分子のシミュレーション



水-ゴム界面の挙動



有限要素法×機械学習



ゲルの不均一構造制御

