

DNA オリガミとナノテクノロジーの融合
The fusion of DNA origami and nanotechnology

京都大学 高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 Namasivayamグループ 延山知弘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、DNA ナノボアの計算に関する検討並びにナノマテリアルの物性計算を行った。まず京都大学宇治キャンパスのリソースを用いて、マセマティカ、Discoverly Studio 等の必要なソフトウェアに関する講習を受けた後、スパコンシステムに対してナノマテリアルの構造最適化計算などを行った。構造最適化計算には Gaussain16 を用いた。本年度は関連ソフトウェアに関する理解を深めると共に、ナノマテリアルに関する各種予備計算を行いつつ、今後の研究に必要な分子動力学シミュレーション・量子化学計算・その他基本的な数値計算に関する理解を深めることが出来た。計算結果は実験分野の研究成果や知見などと統合され、近日中に発表される予定である。最後になりましたが、スパコンシステムに不慣れな中サポートしてくださいました、京都大学化学研究所スパコンシステムの関係者皆様に厚くお礼申し上げます。