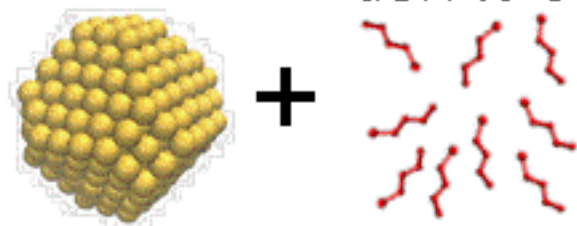


ナノ粒子-生体膜間の相互作用の 分子動力学シミュレーション

大阪府立大学大学院 工学研究科 化学工学分野 仲村英也

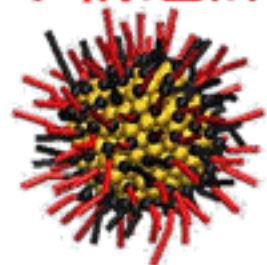
コア金粒子 抗体分子



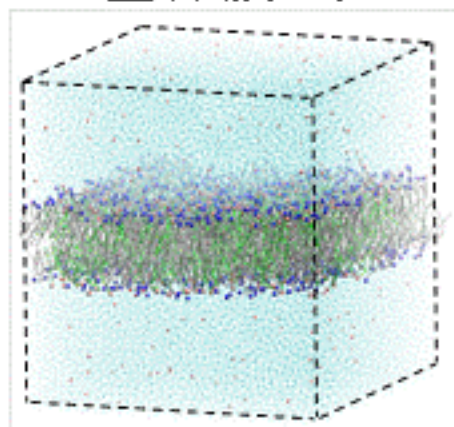
+



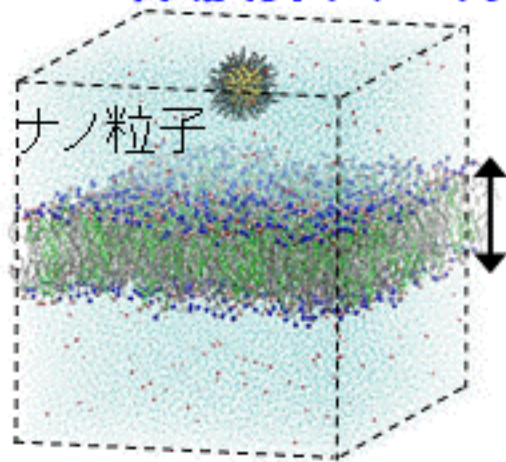
①表面修飾金ナノ粒子の
分子構造計算



生体膜モデル



②ナノ粒子-生体膜界面の分子動力学計算



モデル細胞膜
(リン脂質2重膜)

- ▶ 表面修飾ナノ粒子とモデル細胞膜 (リン脂質2重膜)との相互作用を分子動力学法によりシミュレーションしその相互作用メカニズムの解明に取り組んだ

利用した計算機
平均CPU時間
並列化

PCクラスター
15時間
2ノード:8 CPUs