

浸透圧調節物質の水中での相互作用の解明

大阪大学大学院基礎工学研究科 大戸達彦

- 目的** タンパク質を安定化/不安定化させる浸透圧調節物質どうしの、水中での相互作用を明らかにする
- 内容** トリメチルアミンオキサイド (TMAO) と尿素の水中での自由エネルギー曲面を第一原理分子動力学シミュレーションによって計算する
- 結果** 古典分子動力学法の結果から言われていたこれまでの説とは異なり、TMAOと尿素は水中で直接水素結合しないことが明らかになった。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

OCTOPUS

480000時間
190GB
384並列

