

生体電子移動反応のシミュレーション

JST-PRESTO, 筑波大・計算科学研究センター 氏名 鬼頭 宏任

目的 電子移動機能を持つ、緑膿菌(PA)と好熱性細菌(HT)のCyt c 蛋白質キメラ・ヘテロ・二量体のシミュレーション。

内容 GPU加速化された分子動力学シミュレーションプログラムNAMDをOCTPUS上で用いて、Cyt c二量体の構造熱揺らぎを調べた。

結果 X線結晶構造からの平均二乗偏差(RMSD)を計算すると、溶媒中では複数の準安定構造を持つことが分かった。

利用した計算機

OCTOPUS

ノード時間 90時間

使用メモリ 10GB

並列化 24core/4GPU

