

脂質2分子膜ベシクルの 分子スケールシミュレーション

開発者or連絡先

- 杉井泰介, 東京大学・大学院生
- 高木周, 東京大学・大学院工学系研究科
- 松本洋一郎, 東京大学・大学院工学系研究科

概要

- 脂質2分子膜からなる小胞体(ベシクル, リポソーム)の分子スケールシミュレーション
- 2分子膜ベシクル形成のシミュレーション
- せん断流中でのベシクルの変形シミュレーション

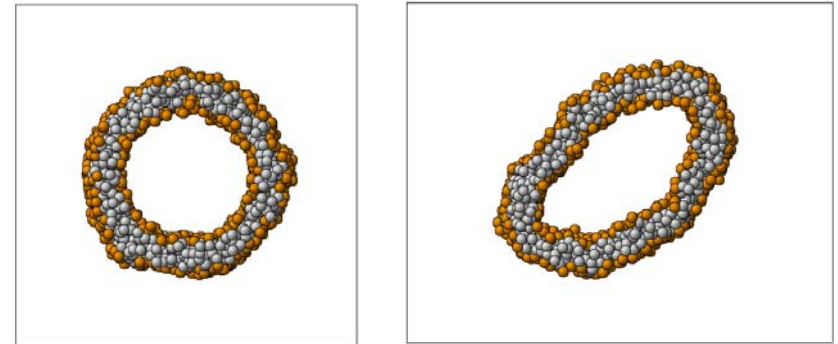
アルゴリズム

- 散逸粒子動力学法 (DPD)

計算規模

- 粒子数
脂質分子 3024分子,
水粒子 179904粒子(ベシクル生成)
水粒子 230928粒子(せん断流)

*図および動画では水粒子は表示していない。



■ どんなことが期待されるか？

- ベシクル内での脂質分子の分子構造, 分子挙動の解明
- 流れ場中における脂質分子および脂質膜の挙動の解析
- 生体細胞やDDSカプセルなどのシミュレーションへの応用