

令和 2 年 6 月 29 日現在

機関番号：13901

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K21094

研究課題名(和文)非対称な脂質組成をもった脂質二重層膜物性の解明

研究課題名(英文)Molecular dynamics study of membrane properties of lipid bilayers with asymmetric lipid composition

研究代表者

安藤 嘉倫 (Andoh, Yoshimichi)

名古屋大学・工学研究科・特任准教授

研究者番号：80509076

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：本課題では、実際の細胞膜(肝臓細胞の細胞膜)の細胞間基質側の外単層膜および細胞質側の内単層膜間での脂質組成の違いを忠実に再現したモデル脂質二重層膜系に対して全原子モデルでの大規模・長時間の分子動力学(MD)シミュレーション研究を実施した。膜の構造および膜の流動性が内外単層膜でどのように異なるか、内外単層膜間での物性の相関がどの程度存在するか、および特定の脂質分子が膜の側方向に凝集する現象の実際を原子・分子のスケールで明らかにした。本研究で用いた細胞膜モデリングの手法および解析手法は広く細胞膜物性に関するシミュレーション研究に応用できる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

細胞膜は単に細胞を形作る隔壁の役割だけでなく、細胞内で生成される物質の代謝やシグナル伝達、さらにウィルス感染経路においても重要な役割を果たしている。本研究は細胞膜の構造的基礎となるリン脂質二重層膜について特に興味を持たれている、内外単層膜間での物性の違い、および膜内でのマイクロドメイン形成についての分子論的知見を与えるものである。研究成果は興隆しつつある膜脂質標的型治療(membrane-lipid therapy)や脂質標的薬剤(lipid-targeted drugs)研究への展開が期待される。

研究成果の概要(英文)：All-atomistic molecular dynamics (MD) calculations were carried out on fully-hydrated lipid bilayer systems modeling asymmetric lipid composition between outer and inner leaflets of hepatocyte plasma membranes. Differences in membrane physico-chemical properties, such as membrane structure, degree of order, and fluidity, between outer and inner leaflets were clarified in a molecular level. Large space-scale and long time-scale MD simulations enabled to explore a molecular picture of the lateral clustering of specific lipid molecules (e.g. cholesterol) and its difference between outer and inner leaflets. Degree of correlation of membrane properties induced by the interdigitation of lipid tails was also investigated. Simulation protocol used in this research can be widely applied to other MD simulation researches with an aim to reveal membrane properties of actual cell plasma membranes.

研究分野：物理化学, 計算化学, 生物物理学

キーワード：細胞膜 肝臓細胞 脂質組成の非対称性 分子動力学計算 リン脂質 スフィンゴミエリン コレステロール ミクロドメイン

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

1. 研究開始当初の背景

細胞膜は細胞の外環境と細胞内組織とを隔てる隔壁としての役割を果たしているだけでなく、物質輸送、化学反応、および生体分子凝集の場としても作用している。細胞膜を構成する生体分子には主に3種類あり、脂質（リン脂質）、膜タンパク質、および糖質である。特にリン脂質は細胞膜の構造上の基盤となる脂質二重層膜を形成し、細胞膜の基本的物性を決定している。

細胞膜を構成する脂質二重層膜の組成上の特徴として以下4つがある。

- [A] 脂質分子種の多様性
- [B] 生体組織ごとの特異性
- [C] 細胞膜外膜と内膜との非対称な脂質種分布
- [D] 特定脂質種の動的な側方凝集および離散（「脂質ラフト(筏)」モデル）

特徴 [A], [B] については、1970年頃から様々な生物、生体組織について単離した細胞膜を対象に脂質組成解析が進められ、生化学の教科書等にその概要がまとめられている。

研究開始当時、特徴 [C], [D] に関わる研究テーマで特に注目を集めていたのは内外膜間での脂質組成の非対称性が細胞膜の物性および機能にどう関与しているか、という点であった。図 1 に示すように一般に細胞膜の外膜にはリン脂質の一種であるホスファチジルコリン(PC) およびスフィンゴリン脂質（スフィンゴミエリン, SM）が、内膜にはホスファチジルエタノールアミン(PE)、ホスファチジルセリン(PS) およびホスファチジルイノシトール(PI)が多く含まれている。外膜中の PC および SM の多くは飽和脂肪酸からなる2本のアシル鎖尾部を、内膜中の PE, PS, および PI は多価不飽和脂肪酸からなる2本のアシル鎖尾部を有している。脂質組成の差異を反映して、内外単層膜間で膜の流動性、物質の透過性、誘電率などの物性に大きな違いがあり、脂質二重層膜全体として細胞膜としての機能を発現しているとの推測がなされていた。しかしながら5 nm 厚さほどの脂質二重層膜の2つの単層膜の物性を既存の実験的手法により別々に計測することは容易ではなく、分子レベルでの詳細を調べる別の方法が求められていた。

その筆頭候補は分子動力学 (MD) シミュレーションである。2010年ころから実際の細胞膜組成を再現した脂質二重層膜についての MD シミュレーション研究が発表されるようになった。その一方、「京」コンピュータに代表されるスーパーコンピュータの発展により、数十ナノメートルの空間スケールを持つ生体系に対して数百ナノ秒程度の MD シミュレーションが可能になった。細胞膜と同じように頭非対称な脂質組成もった脂質二重層膜を対象としたMDシミュレーションにより、内外2つの単層膜間での膜物性の差異を明らかにする研究が期待されていた。

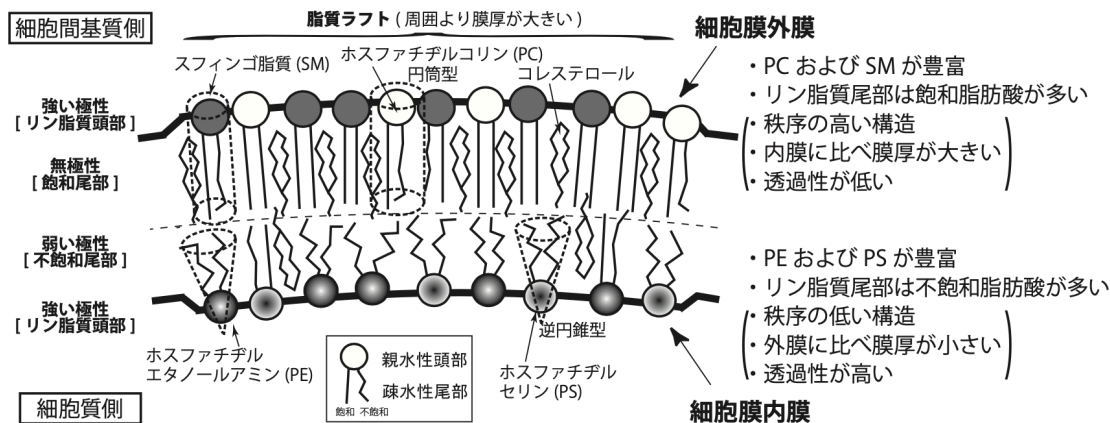


図1 細胞膜の模式図。左側の注記は深さ方向への膜内の極性変化について、右側の注記は脂質組成についての一般的な特徴、および丸括弧 () 内は内膜と外膜の物性の違いについての推測。

2. 研究の目的

本研究ではX線回折、分光学的手法および蛍光顕微鏡など既存の実験的手法では解明の難しい、細胞膜の内外単層膜間での膜物性の違いおよびコレステロールに代表される特定脂質分子の側方凝集および離散のようすを、1つ1つの原子座標の時間発展を追跡できる MD シミュレーションの利点を活かし原子・分子レベルの解像度で明らかにする。これまで推測されていた図1のような描像を、分子集団の構造および各分子の運動をもとに明確に定義された物理量によって定量的に議論する。さらに単層膜間での物性の相関の程度についても明らかにする。

3. 研究の方法

(1) 細胞膜の内外単層膜モデルの構築

モデル化の対象として上記特徴 [A] および [B] の詳細がよく調べられているマウスの肝臓細胞

細胞膜を選んだ。特徴 [C] については、一般的な知見、すなわち外単層膜において PC および SM が豊富であるのに対し内単層膜で PE, PS および PI が豊富であること、を捉えつつ、コレステロールの内外単層膜への分配比についても X 線回折実験からの知見と一致させた。リン脂質アシル鎖尾部の長さおよび不飽和度についても実験の成分分析と一致させた。さらに溶媒についても細胞外液と細胞内液のイオン組成 (イオン種および濃度) を再現するものとした。図 2 に作成した二重層膜モデルの計算系を示す。

(2) MD シミュレーション

2 ステップからなる MD 計算を行った。まずステップ 1 では外膜どうし内膜どうしを張り合わせた系を 2 つ用意した。系の原子数 N , 温度 $T = 310.15 \text{ K}$ (37°C), 圧力 $P = 1 \text{ atm}$ 一定の条件のもと 1 マイクロ秒程度の MD シミュレーションを行い、生体条件下での平衡構造を内外単層膜モデルごとに計算した。同時に膜の基本的物性についても解析した。ステップ 2 では内外単層膜の面積が同じになるよう脂質分子数を調整した上で、別々の単層膜を貼り合わせて非対称な脂質組成を持った脂質二重層膜系を構築した。さらにシミュレーション基本セル内に 2 つの脂質二重層膜を向かい合うように配置し、二重層膜間の水層イオン濃度について細胞内と細胞外の環境を再現するような系を構築した。これら系についても温度 $T = 310.15 \text{ K}$ (37°C), 圧力 $P = 1 \text{ atm}$ 一定の条件のもと 1 マイクロ秒程度のシミュレーションを行った上で、膜の基本的物性の単層膜間での相関および側方向の脂質分子凝集に関する解析を行った。

4. 研究成果

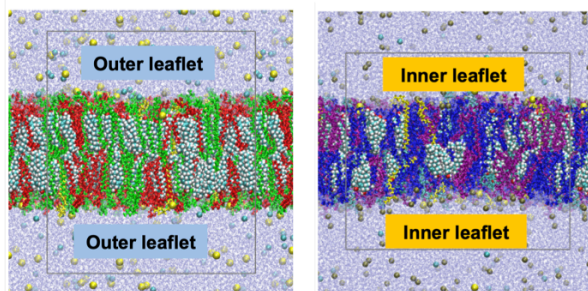
(1) 内外単層膜の物性

初期配置において人工的に並べられていた分子は、 NTP 一定の条件下での十分に長い MD 計算の結果、与えられた温度・圧力条件下での“自然な”分子配置に収束し、熱ゆらぎをともないつつ平衡状態に達した。ステップ 1 でのシミュレーションから、外単層膜は内単層膜に比べ 20% 程度側方向に縮んだかたい構造をとっていること、膜面内の脂質分子配置およびリン脂質尾部アシル鎖の配座は外膜でより秩序立っていること、それら構造的差異によって脂質分子の膜面に沿った拡散性や分子内の運動性が内単層膜においてより増大していることを各種物理量によって示した。

(2) コレステロールの側方凝集

図 3A および 3B には「脂質ラフト」の主成分の 1 つであるコレステロールについて、膜内で自発的に形成されたクラスターの例を示す。MD 計算ではこれらクラスターが動的

ステップ1: 外単層膜, 内単層膜をそれぞれ2つ貼り合わせた系



ステップ2: 外単層膜と内単層膜を貼り合わせた系(左), さらに非対称な脂質組成を持った二重層膜2つを向かい合わせに配した系(右)

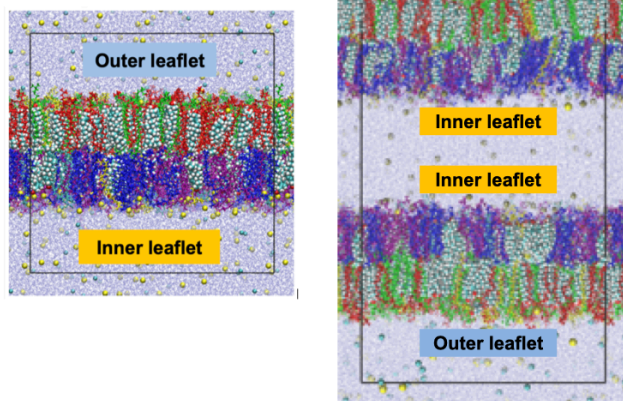


図2 計算系の外観。二重層膜を構成する脂質分子の色分けは、赤(PC), 緑(SM), 青(PE), 紫(PS), 水色(PI), 黄(リゾPCないしPS)。コレステロールは空間充填モデルで表示。二重層膜上下の水溶液層にある球は各種イオン(黄, Na^+ ; シアン, Cl^- ; 灰色, K^+)。計算系は三次元周期境界条件下にあり黒線が基本セル境界。

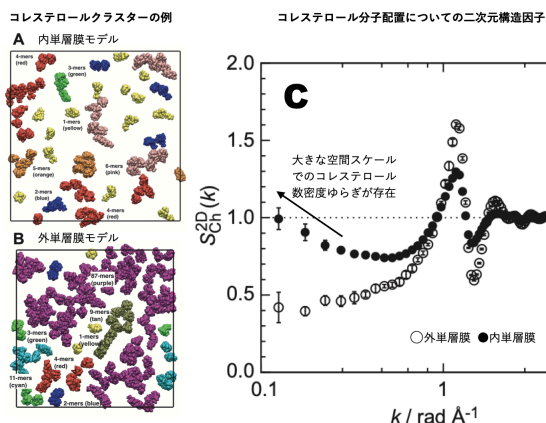


図3 検出されたコレステロールクラスターの例 (A, B), および空間スケールごとの数密度ゆらぎの大きさを表す二次元構造因子 $S_{\text{ch}}^{2D}(k)$ (C)。

に離散, 集合している様子を直接観測できる. 図 3C はそれぞれの単層膜内でのコレステロール分子の二次元数密度ゆらぎがどの程度の空間スケールを持っているかを計測した結果である. 波数 k の逆数が空間スケールを二次元構造因子 $S_{\text{chol}}^{2D}(k)$ がその強さを表しており, 特に内単層膜において臨界密度揺らぎに似た大きな数密度揺らぎを伴いつつコレステロール分子が離散・集合を繰り返していることが明らかになった. さらに計算した二次元中間散乱関数から, 波数 k ごとの揺らぎの時定数は k が小さい(すなわち揺らぎの空間スケールが大きい)ほど遅いこともわかった.

(3) 単層膜間の物性相関

図 4 にはステップ 2 でのシミュレーションから得られた, ある時刻におけるコレステロール分子の凝集位置およびその凝集強さ(結合数)の膜面方向にそった二次元マップを示す. 外単層膜でコレステロールが密に凝集している場所では反対の内単層膜ではコレステロールが凝集しづらい傾向があることがわかった. 詳細な解析を行うことで, そのような単層膜間での相互排除的なコレステロール分子の側方凝集が発生する分子メカニズムについても明らかにした.

以上のまとめおよび今後の展望として, 本研究により実際の細胞膜の内外単層膜にある膜物性の違い, 特定脂質種の側方凝集の実際, およびその相関が明らかになった. 最近では腫瘍, アルツハイマー病, 高血圧といった疾病に対してリポミクス (lipidomics) の考え方をベースとした膜脂質標的型治療 (membrane-lipid therapy) や脂質標的薬剤 (lipid-targeted drugs) の研究が注目されている. 機能異常となった細胞の細胞膜脂質組成を外部からの脂質リポソーム投与により調整してやることで膜の正常な機能を回復させるという治療方法である. いったん細胞膜脂質組成の詳細がわかれば, 本研究でのシミュレーション手順を踏むことで計算機上にいかなる細胞膜についてもそのモデル二重層膜を再現することができる. さらに膜タンパク質や糖質をモデルに含めることで, 細胞膜機能異常の分子論および薬剤としての脂質分子設計といった応用研究へ MD シミュレーションの展開が期待できる.

また今後もスーパーコンピュータの計算機能力は向上し続け, その能力を生かすことで, より大きな脂質二重層膜系を実験に迫る時間スケール (サブミリ秒) で計算できるようになることが期待されている. 詳細は割愛するが, 本課題の範囲内で計算精度を保ちつつ大規模・長時間の MD シミュレーションを実行するための方法論の開発を進めてきた. それら方法論は次世代のスーパーコンピュータ「富岳」上において, 膜タンパク質を含んだようなより現実に近い細胞膜の MD シミュレーションを行う上で不可欠である.

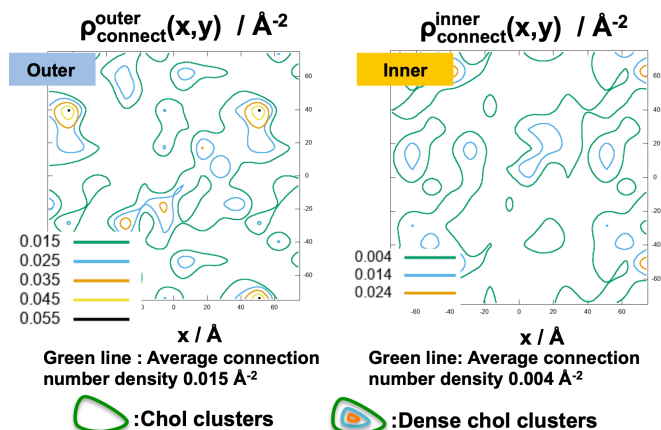


図4 コレステロール分子間の結合強さ(結合数)の二次元マップ. 外単層膜でコレステロールが凝集している位置に内単層膜ではコレステロールが凝集しづらい傾向が見て取れる.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Yoshimichi Andoh, Shiho Hayakawa, and Susumu Okazaki	4. 巻 -
2. 論文標題 Molecular dynamics study of lipid bilayers modeling outer and inner leaflets of plasma membranes of mouse hepatocytes. I: Differences in physicochemical properties between the two leaflets	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Andoh Yoshimichi, Yoshii Noriyuki, Okazaki Susumu	4. 巻 41
2. 論文標題 Extension of the fast multipole method for the rectangular cells with an anisotropic partition tree structure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1353 ~ 1367
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26180	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Noriyuki Yoshii, Yoshimichi Andoh, Susumu Okazaki	4. 巻 41
2. 論文標題 Fast multipole method for three dimensional systems with periodic boundary condition in two directions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 940 ~ 948
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26141	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 ANDOH Yoshimichi, OKAZAKI Susumu	4. 巻 19
2. 論文標題 All-atom Molecular Dynamics Simulation Study of Self-assemblies of Amphiphilic Molecules in Solution	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Oleoscience	6. 最初と最後の頁 447 ~ 453
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5650/oleoscience.19.447	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takeda Kosuke, Andoh Yoshimichi, Shinoda Wataru, Okazaki Susumu	4. 巻 35
2. 論文標題 Molecular Behavior of Linear Alkylbenzene Sulfonate in Hydrated Crystal, Tilted Gel, and Liquid Crystal Phases Studied by Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 10877 ~ 10884
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.9b01607	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takeda Kosuke, Andoh Yoshimichi, Shinoda Wataru, Okazaki Susumu	4. 巻 35
2. 論文標題 Structure of Hydrated Crystal (Lc), Tilted Gel (L), and Liquid Crystal (L) Phases of Linear Alkylbenzene Sulfonate (LAS) Studied by X-ray Diffraction and Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 9011 ~ 9019
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.9b01199	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Andoh Yoshimichi, Kitou Sakiho, Okazaki Susumu	4. 巻 271
2. 論文標題 Difference in molecular mechanisms governing changes in membrane properties of phospholipid bilayers induced by addition of nonionic and zwitterionic surfactants	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Liquids	6. 最初と最後の頁 933-941
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molliq.2018.09.018	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Andoh Yoshimichi, Mohamed Siti Nor Syafawani, Kitou Sakiho, Okazaki Susumu	4. 巻 43
2. 論文標題 Structural ordering of lipid bilayers induced by surfactant molecules with small hydrophilic head group	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 1247 ~ 1255
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08927022.2017.1319061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Andoh Yoshimichi, Suzuki Soichiro, Ohshima Satoshi, Sakashita Tatsuya, Ogino Masao, Katagiri Takahiro, Yoshii Noriyuki, Okazaki Susumu	4. 巻 74
2. 論文標題 A thread-level parallelization of pairwise additive potential and force calculations suitable for current many-core architectures	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Supercomputing	6. 最初と最後の頁 2449 ~ 2469
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11227-018-2272-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshii Noriyuki, Andoh Yoshimichi, Okazaki Susumu	4. 巻 39
2. 論文標題 Pressure tensor for electrostatic interaction calculated by fast multipole method with periodic boundary condition	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1192 ~ 1199
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25179	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Andoh Yoshimichi, Yoshii Noriyuki, Yamada Atsushi, Okazaki Susumu	4. 巻 38
2. 論文標題 Evaluation of atomic pressure in the multiple time step integration algorithm	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 704-713
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.24731	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計24件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 6件）

1. 発表者名 安藤嘉倫、坂下達哉、張家超、朱喆、浦野諒、藤本和土、吉井範行、岡崎進
2. 発表標題 次期スパコン「富岳」での大規模・長時間分子動力学計算実現のためのソフトウェアMODYLASの性能向上
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshinichi Andoh, Shiho Hayakawa, Susumu Okazaki
2. 発表標題 Molecular dynamics study on correlation of membrane properties between outer and inner leaflets of cell plasma membranes
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 安藤嘉倫、早川志保、岡崎進
2. 発表標題 細胞膜内でのコレステロール分子側方凝集に関する理論的研究
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 安藤嘉倫、早川志保、岡崎進
2. 発表標題 非対称な脂質組成を持った脂質二重層膜内での脂質分子側方凝集に関する理論的研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 安藤 嘉倫, 早川 志保, 岡崎 進
2. 発表標題 脂質組成に非対称性をもつモデル脂質二重膜の分子動力学計算
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名	Molecular dynamics study on lipid bilayers with asymmetric lipid composition modeling cell plasma membranes
2. 発表標題	Yoshimichi Andoh, Shiho Hayakawa, Susumu Okazaki
3. 学会等名	Joint Conference of EMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年	2018年

1. 発表者名	安藤 嘉倫, 早川 志保, 岡崎 進
2. 発表標題	非対称な脂質組成を持った脂質二重層膜モデル内での脂質分子側方凝集に関する理論的研究
3. 学会等名	第10回生体界面研究会
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	Solvent effect on lateral interaction between two cholesterol molecules in lipid bilayers
2. 発表標題	Ayato Matsuoka, Yoshimichi Andoh, Susumu Okazaki
3. 学会等名	Joint Conference of EMLG/JMLG Annual Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年	2018年

1. 発表者名	安藤 嘉倫, 坂下 達哉, 吉井 範行, 岡崎 進
2. 発表標題	大規模分子動力学計算高速化のための新規MPI通信方法の開発
3. 学会等名	第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年	2018年

1. 発表者名 松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 脂質二重層膜中のコレステロール二分子間側方相互作用にリン脂質および水が果たす役割の解明
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 安藤 嘉倫
2. 発表標題 汎用分子動力学計算ソフトウェアMODYLASへの自動チューニング技術適用の展望
3. 学会等名 第10回自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 早川志保, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 細胞膜の外単層膜と内単層膜間での膜物性の違いに関する研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 早川志保, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 脂質組成の非対称性を考慮したモデル脂質二重膜の分子動力学計算
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Andoh Yoshimichi, Hayakawa Shiho, Okazaki Suzumu
2. 発表標題 Molecular dynamics study of differences in membrane properties between outer and inner leaflets of cell plasma membranes
3. 学会等名 Joint EMLG/JMLG Meeting 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 安藤嘉倫, 早川志保, 岡崎進
2. 発表標題 脂質組成の非対称性を考慮したモデル脂質二重膜の分子動力学計算
3. 学会等名 第40回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 脂質二重膜中のコレステロール2分子間側方相互作用への溶媒効果の解明
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 早川志保, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 細胞膜の外単層膜と内単層膜間での膜物性の違いに関する研究
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Andoh Yoshimichi
2. 発表標題 Recent developments of molecular dynamics calculation software MODYLAS
3. 学会等名 5th ADAC workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 安藤嘉倫, 青木則之, 岡崎進
2. 発表標題 肝臓細胞膜を模した脂質二重層膜の全原子分子動力学計算
3. 学会等名 第10回分子科学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 鬼頭咲帆, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 親水性および疎水性の異なる直鎖界面活性剤分子添加によるDMPC 脂質二重層膜の物性変化
3. 学会等名 第39回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 安藤嘉倫, 吉井範行, 山田篤志, 岡崎進
2. 発表標題 マルチタイムステップ数値積分法(RESPA) に基 づく分子動力学計算での圧力値算出における問題
3. 学会等名 第30 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 リン脂質二重層膜中でのコレステロール間側方相互作用のリン脂質種依存性
3. 学会等名 第39回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進
2. 発表標題 リン脂質二重層膜中でのコレステロール間側方相互作用のリン脂質種依存性
3. 学会等名 第30 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Y. Andoh, N. Yoshii, A. Yamada, S. Okazaki
2. 発表標題 An attempt to estimate correct atomic pressure in the multiple time-step integration algorithm
3. 学会等名 The 4th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計3件

1. 著者名 M. Geshi (Ed.), Y Andoh, N Yoshii, J Jung, Y Sugita (Chapter 5)	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer Singapore	5. 総ページ数 41
3. 書名 The Art of High Performance Computing for Computational Science: Advanced techniques and examples for materials science, vol. 2, 117-157. Acceleration of Classical Molecular Dynamics Simulations	

1. 著者名 下司 雅章(編)、安藤嘉倫(第6章分担)	4. 発行年 2017年
2. 出版社 大阪大学出版会	5. 総ページ数 32
3. 書名 計算科学のためのHPC技術2	

1. 著者名 安藤嘉倫	4. 発行年 2018年
2. 出版社 ニューサイエンス社	5. 総ページ数 2
3. 書名 月刊細胞 50巻 (3), 43-44. 分子シミュレーションによる非対称な脂質組成をもった脂質二重層膜物性の解明	

〔産業財産権〕

〔その他〕

名古屋大学 教員情報検索 http://profs.provost.nagoya-u.ac.jp/view/html/100007950_ja.html

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考