

IV 生命科学研究部門

IV-1.生命機能情報分野

1. メンバー

助教 庄司光男

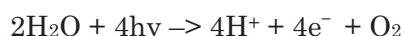
2. 概要

生命機能情報分野では生体内で重要な働きをしている蛋白質、核酸等に注目し、その特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 24 年度では、光合成酸素発生中心(PSII-OEC)、トレオニン合成酵素(TS)、DNA トポイソメラーゼについて、高精度計算手法(QM/MM)により、その特異的反応機構を生み出す分子メカニズムの解明を行った。また、異常型プリオン蛋白質の立体構造評価研究においては、全原子分子動力学法(MD)により構成アミノ酸特有の特徴(ケミカルトレンド)を明らかにした。これらの研究には膨大な計算を高速に実行する必要がある為、並列化効率の向上に取り組みながらスーパーコンピュータ(T2K-Tsukuba,HA-PACS)を活用した。さらなる高速化と次世代計算機環境への展開として、GPUによるQM計算の高速化を行った。宇宙生命分野においてはL型アミノ酸生成過程と系外惑星のバイオマーカーについての理論的研究を行った。

3. 研究成果

[1] 光合成酸素発生中心(PSII-OEC)の電子状態についての理論的研究(庄司)

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに変換するシステムであり、個々の現象は秒スケールの現象であるが、分子進化や多様性まで考慮すれば、極めて長い時間空間スケールでの、極めて複雑かつ重要なシステムである。光合成は蛋白質複合体の集合体で構成されており、各複合体は光捕集、電子伝達、ATP生成と糖生成(酸素固定反応)の働きを担っている。電子伝達系における重要な化学反応として光合成システムIIにおける酸素発生中心(PSII-OEC)があり、水の分解反応を行っている。



この反応は電子を水から引き抜いていることから分かるように、極めて難しい化学反応である。実際、すべての人工触媒においてPSII-OECよりも高い触媒効率と耐性を持つものは未だ存在していない。2011年に沈教授(岡大)、神谷教授(大阪市大)により原子分解能(1.9Å)のX線構造解析がなされ、初めて活性中心構造とその周りの水分子の位置が明らかになった。活性中心はCaMn₄O₅クラスターが歪んだ椅子型構造を取っていた。しかしながらその構造は以前に報告されていた構造とは大きく異なっていたため、多くのグループによりその構造妥当性が検討された。我々はOECの構造妥当性を検証するため、量子古典混合法(QM/MM)法を用いて、精密に理論的検討を行った。特にプロトン位置はX線では決定できないが、プロトン化によってOECの電子状態や構造が大きく変化するため、すべての

可能な電荷・スピン・プロトン化状態を求め、PSII-OEC の構造特性について明らかにした。

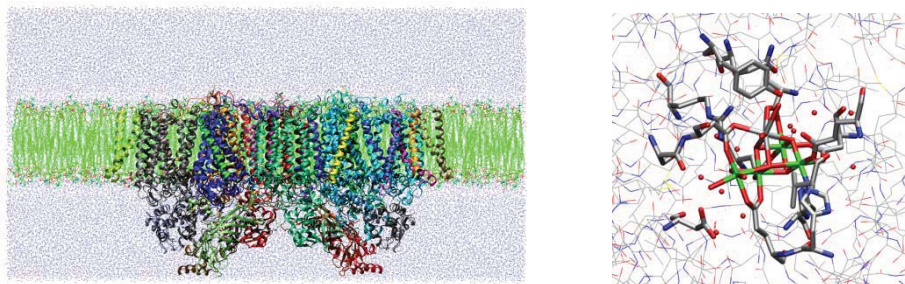


図 1. 光合成システム II(左図)と水分解サイト(右図)

【2】トレオニン合成酵素の特異的反応機構の理論的解明 (庄司)

生体酵素における反応機構と反応制御機構（副反応の抑制機構）は、化学合成における究極のテーマといっても過言でないほど重要である。トレオニン合成酵素(TS)はトレオニン生合成の最終ステップである *o*-phospho-L-homoserine(OPLH) から L-トレオニンを生成する段階を触媒しており、いくつもの副生成物(α -ケトブチラート、ケトン)の生成を制御している。しかしながら未だTSの反応制御機構は明らかにされておらず、その本質の解明のためには基質・酵素複合体で各反応経路における構造変化とエネルギープロファイルを明らかにすることが不可欠である。そこで、我々はTSの反応特異性に関わる反応過程に対して高精度理論解析(QM/MM計算)を行い、反応制御機構の解明を試みた。プロトン化状態と活性中心における水の存在を調べ、可能な反応経路を網羅的に探索した。その結果、自由エネルギーが実験値と 3kcal 以内で一致し、中間体の UV スペクトル形状も完全に実験と一致した。これにより、反応制御因子を明らかにするとともに各中間体の構造特性も初めて明らかにした。

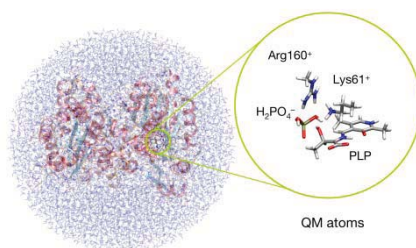


図 2. トレオニン合成酵素の QM/MM モデル: (左)全系, (右)QM 領域

【3】DNA トポイソメラーゼ II における DNA 再結合反応の理論的解明 (花岡恭平)

DNA トポイソメラーゼ II (topoII) は DNA の切断と再結合を行い、非常に長い DNA の構造的ストレスを緩和している。この反応では、DNA と酵素の共有結合中間体が生成し、細胞にとって危険な状態が一時的に生じる。通常この中間体は再結合反応によって速やかに解消されるが、いくつかの重要な抗生物質や抗がん剤は再結合反応を阻害することで共有結

合中間体を蓄積させ、癌細胞や細菌を死滅させる。したがって DNA トポイソメラーゼの再結合過程の解明は新たな抗がん剤や抗生物質をデザインする上でも非常に重要である。本研究では量子古典混合法(QM/MM)により topoII の DNA 再結合反応機構を解明する事を試みた。反応は DNA 3'0 の脱プロトン化から始まり、このプロトンは切断された DNA の間を移動し、さらに周囲の水、アルギニン残基を経由して、DNA から解離したタイロシン残基に移るといふ多段階プロトン移動経路(substrate-mediated proton transfer: SMPT)を持つ事を明らかにした。経路するアミノ酸残基はアルギニンだけであるが、これはアルギニンの変異により再結合反応が阻害され細胞が死滅するという実験と一致している。そのため、本結果は上記のプロトン移動経路を阻害することで新しい抗がん剤や抗生物質がデザインできることを示唆している。

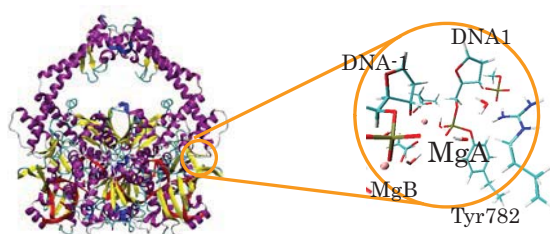


図 3. DNA-topoII の全体構造と活性中心構造

【4】系外惑星における生命指標検出に向けた理論的検討（田口真彦）

近年、太陽系外惑星の数は大きく追加されており、ハビタブルゾーン内に入る惑星の観測にも成功し、地球に類似した惑星の発見が期待されている。それに伴い、惑星のスペクトルから生命の痕跡（バイオマーカー）をいかに検出するかについても非常に注目がなされている。バイオマーカーには様々な指標が提案されているが、その中でも red edge がある。これは、植物の反射スペクトル由来し、700-750nm 付近の近赤外領域に見られる特徴的な急勾配である。この勾配の由来は様々なスケールでの要因が関わっているが、主要な要因としては光合成色素の 1 つであるクロロフィルの吸収スペクトルである。

系外惑星における生命指標の変性を明らかにするためには、地球における red edge 相当のスペクトルの環境依存性を明らかにすることが極めて重要と考えられる。特にクロロフィルの吸収スペクトルがタンパク質環境やアミノ酸配位子によりどの程度変性があるのかについて高精度計算法 (QM/MM 法) により理論的に評価した。その結果、タンパク質環境は約+9nm シフトさせており、アミノ酸の配位により約+13nm シフトさせている事を明らかにした。これらの結果をもとに、系外惑星における植物の光吸収について考察した。

【5】異常型プリオン蛋白質の構造安定性評価（近藤大生）

プリオンとは哺乳類で発見されたタンパク質性の感染因子のことである。正常な立体構

造とは異なる立体構造のタンパク質(プリオン)が、正常型タンパク質を次々と異常型に転換、凝集していくことで、アミロイド線維と呼ばれる線維構造を形成する。これらは哺乳類ではアルツハイマー病やパーキンソン病のような神経疾患を引き起こすことが知られている(ポリグルタミン、ポリアスパラギン、酵母プリオン Sup35 等)。これらのタンパク質の立体構造は未だに決定されていない。しかし、X線回折や末端残基の微結晶構造から、 β -helix モデルと in-register モデルの2つの主要な構造モデルが提案されている。また、プリオン蛋白質はグルタミン(Q)やアスパラギン(N)を組成として多く持つ事が分かっている。そこで、グルタミン組成を仮定し、 β -helix と in-register モデルを構築し、全原子分子動力学計算(MD)法を用いて、 $1\mu\text{s}$ -MDを行う事で自由エネルギーを算出し、正確な構造安定化機構を明らかにすることを試みた。 β -helix モデルは一巻き20個のアミノ酸を有し、ピッチが約 4.7 \AA のヘリックス構造をしており、ヘリックス内部に水が存在した。一方、in-register モデルは、2つの β シートが合い向かい合い、非常に密にかみ合うことでシート間の水を排除していた。共に安定な構造であり、自由エネルギー差は数 kcal のオーダーとなった。 β -helix モデルではグルタミン側鎖は親水的な役割をしており、in-register モデルでは疎水的役割で構造安定化に寄与している事を明らかにした。

【6】GPGPUによる量子化学計算法の高速化(梅田)

生命科学研究分野では、より短期間での問題解明やよりリアリスティックなシミュレーションのために、計算のさらなる高速化と大規模化対応が欠かせない。一方、近年の計算機環境は目覚ましく発展しており、CPU単体の演算性能向上は見込めない段階に達し、超並列やヘテロ並列計算による高速化が必須となる時代になってきている。中でも、GPUを用いるヘテロ計算機は消費電力や計算機コストの点でメリットが非常に大きい。そのため我々はQM/MM計算をGPU環境で行う事で、新たな生命科学研究領域を開拓することを試みている。

QM/MM計算においてボトルネックはQM(量子力学)計算であり、その中でも二電子積分ルーチンが最も重い。パッケージに組み込まれているCPU二電子積分コードは非常に煩雑であり、GPU対応させることは非常に難しい。そこで、改良が行いやすいOpenFMOにおいて二電子積分ルーチンをGPU対応させた。その結果、GPU利用により最大CPU1Coreに対して最大22倍の演算加速性能を得られるようになった。本研究は梅田宏明が主に研究を進め、朴泰介、埴敏博、庄司光男の協同研究体制でなされた。

4. 教育

学生の指導状況

1. 近藤大生、Q/Nに富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析、修士論文。

2. 田口真彦、Theoretical study on the absorption spectrum of light-harvesting antenna in photosynthesis based on time-dependent density functional theory and its application for the detection of biomarker in extrasolar planets、修士論文。
3. 氏家謙、分子動力学法によるトレオニンシンターゼの基質結合自由エネルギー計算、卒研発表。
4. 田中弥、高度好熱菌ウリジンシチジンキナーゼ (ttCK) の特異的基質認識機構の理論的解明、卒研発表。

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞（賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日）

外部資金（名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名）

知的財産権（種別、氏名、課題名、年月日）

<外部資金>

- (ア) 科研費、若手研究 B、研究代表者：庄司光男、生体酵素における反応機構と反応制御機構解明のための理論的研究、2012-2013.
2. 科研費、特別推進、研究代表：沈建仁、光合成系 I I における水分解反応の学理解明、2012-2017、研究分担：庄司光男。

6. 研究業績

(5) 研究論文

A) 査読付き論文

1. M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, A. Sato, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, A QM/MM study of nitric oxide reductase-catalyzed N_2O formation, Molecular Physics, accepted 2013.
2. K. Yamaguchi, M. Shoji, H. Isobe, Y. Kitagawa, S. Yamada, T. Kawakami, S. Yamanaka, M. Okumura, Theory of chemical bonds in metalloenzymes XVI. Oxygen activation by high-valent transition metal ions in native and artificial systems, Polyhedron, In Press.
3. M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Umena, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen and K. Yamaguchi, Theoretical insight in to hydrogen-bonding networks and proton wire for the $CaMn_4O_5$ cluster of photosystem II. Elongation of Mn-Mn distances with hydrogen bonds, Catal. Sci. Technol., 3, 1831(2013)
4. K. Yamaguchi, Y. Kitagawa, H. Isobe, M. Shoji, S. Yamanaka, M. Okumura, Theory of chemical bonds in metalloenzymes XVIII. Importance of mixed-valence configurations for Mn_5O_5 , $CaMn_4O_5$ and $Ca_2Mn_3O_5$ clusters revealed by UB3LYP computations. A bio-inspired strategy for artificial photosynthesis, Polyhedron, 57, 138(2013).

5. K. Yamaguchi, S. Yamanaka, H. Isobe, T. Saito, K. Kanda, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, M. Okumura, H. Nakamura, M. Shoji and Y. Yoshioka, The nature of chemical bonds of the CaMn_4O_5 cluster in oxygen evolving complex of photosystem II: Jahn-Teller distortion and its suppression by Ca doping in cubane structures, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 453(2013).
6. K. Yamaguchi, H. Isobe, S. Yamanaka, T. Saito, K. Kanda, M. Shoji, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya and M. Okumura, Full geometry optimizations of the mixed-valence $\text{CaMn}_4\text{O}_4\text{X}(\text{H}_2\text{O})_4$ ($\text{X}=\text{OH}$ or O) cluster in OEC of PS II: Degree of symmetry breaking of the labile Mn-X-Mn bond revealed by several hybrid DFT calculations, *Int. J. Quantum Chem.*, 113, 525 (2012).
7. T. Saito, S. Yamanaka, K. Kanda, H. Isobe, Y. Takano, Y. Shigeta, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, M. Okumura, M. Shoji, Y. Yoshioka and K. Yamaguchi, Possible mechanisms of water splitting reaction based on proton and electron release pathways revealed for CaMn_4O_5 cluster of PSII refined to 1.9 Å X-ray resolution, *Int. J. Quantum Chem.*, 112, 253(2012).
8. H. Isobe, M. Shoji, S. Yamanaka, Y. Umena, K. Kawakami, N. Kamiya, J.-R. Shen and K. Yamaguchi, Theoretical illumination of water-inserted structures of the CaMn_4O_5 cluster in the S2 and S3 states of oxygen-evolving complex of photosystem II: full geometry optimizations by B3LYP hybrid density functional *Dalton Trans.*, 41, 13727(2012).

B) 査読無し論文

(6) 国際会議発表

A) 招待講演

1. O.M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, N. Kamiya, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, A QM/MM study on the S2 spin state of the oxygen-evolving complex, 第5回 OCARINA シンポジウム, 大阪市立大学, 2013/3/5, oral.

B) 一般講演

1. O.M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, H. Umeda, K. Kamiya, K. Shiraishi, A QM/MM study of nitric oxide reductase-catalyzed N_2O formation, Sanibel Symposium, Florida, 2013/2/17-22, poster.
2. O.M. Shoji, H. Isobe, S. Yamanaka, K. Yamaguchi, J.-R. Shen, Ground spin state of the oxygen-evolving complex at the S2 state, Structure and Dynamics of Photosynthetic Systems, Okayama, 2012/10/22, poster.

3. ○K. Hanaoka, M. Shoji, D. Kondo, A. Sato, M.-Y. Yang, K. Kamiya, K. Shiraishi, QM/MM simulation revealed a substrate mediated proton relay mechanism in DNA religation reaction catalyzed by Type II DNA topoisomerase, CCP2012, Kobe, 2012/10/13, poster.
4. ○M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, H. Umeda, K. Kamiya, Y. Kitagawa, K. Shiraishi, QM/MM study on the catalytic mechanism of nitric oxide reductase, 2012 International Congress of Quantum Chemistry (ICQC2012), June 25 - 30, 2012, Boulder, Colorado, poster.

(7) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

B) その他の発表

1. ○庄司光男、花岡恭平、氏家謙、田中弥、栢沼愛、梅田宏明、町田康博、村川武志、林秀行、トレオニン合成酵素におけるリン酸脱離以降の反応経路についての理論的検証、日本農芸化学会、東北大学、2013/03/26, 口頭。
2. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、光化学系 II アンテナ部の光捕集機構についての量子化学的研究、第 9 3 回日本化学会春季年会、立命館大学、2013/3/22, 3G3-06(口頭)。
3. ○栢沼愛、花岡恭平、近藤大生、田口真彦、庄司光男、ニトリルヒドラーゼの触媒機構に関する理論的研究、第 9 3 回日本化学会春季年会、立命館大学、2013/3/22, ポスター。
4. ○庄司光男、磯部寛、山中秀介、山口兆、沈建仁、QM/MM 法による光合成酸素発生中心の S₂ 中間体の電子状態についての理論的研究、第 9 3 回日本化学会春季年会、立命館大学、2013/3/22, 1PA-098(ポスター)。
5. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、生命指標となりうる光合成の光吸収スペクトル帰属についての理論的研究、2013 年日本天文学会春季年会、埼玉大学、2013/3/20, P53b(ポスター)。
6. ○小松勇、梅村雅之、庄司光男、矢花一浩、白石賢二、神谷克政、栢沼愛、田口真彦、佐藤皓允、蘇垠成、系外惑星バイオマーカー検出を目指した光合成機構のエネルギー移動計算、2013 年日本天文学会春季年会、埼玉大学、2013/3/20, P74a(口頭)。
7. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇垠成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、時間依存密度汎関数法に基づく光合成アンテナ部の吸収スペクトルの研究とそれを用いた系外惑星における生命指標検出に向けての検討、Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所 2013/1/22-23。
8. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、田口真彦、神谷克政、白石賢二、QM/MM 法を用いた II 型 DNA トポイソメラーゼによる DNA 再結合反応の解明、Supercomputer workshop 2013, 分子

科学研究所, 2013/1/22-23.

9. ○近藤大生、花岡恭平、田口真彦、神谷克政、庄司光男、河合繁子、田口英樹、白石賢二、Gln や Asn を多く含むミスフォールドしたタンパク質の構造安定化機構に関する理論的研究、Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所, 2013/1/22-23.
10. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、梅田宏明、神谷克政、白石賢二、一酸化窒素還元酵素における N2O 生成機構についての理論的研究、Supercomputer workshop 2013, 分子科学研究所, 2013/1/22-23.
11. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇根成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、光合成光捕集複合体 II における光励起状態についての理論的研究、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
12. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、田口真彦、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、アゴニスト結合型ビタミン D 受容体の溶液中のダイナミクスと活性制御機構、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
13. ○近藤大生、花岡恭平、田口真彦、神谷克政、庄司光男、河合(野間) 繁子、田口英樹、白石賢二、Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の理論的解析、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
14. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、田口真彦、栢沼愛、梅田宏明、鴨志田良和、神谷克政、白石賢二、村川武志、林秀行、トレオニン合成酵素におけるリン酸脱離以降の反応機構についての理論的解明、第 85 回日本生化学会大会@福岡国際会議場, 2012/12/16, ポスター。
15. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、田口真彦、栢沼愛、神谷克政、白石賢二、アゴニスト結合型ビタミン D 受容体のマイナーコンフォメーション、第 35 回日本分子生物学会年会@福岡国際会議場、2012/12/11, ポスター。
16. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇根成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、光合成光化学系 II におけるアンテナ部の光捕集機構についての理論的研究、第 35 回日本分子生物学会年会@福岡国際会議場、2012/12/11, ポスター。
17. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、梅田宏明、神谷克政、白石賢二、一酸化窒素還元酵素における N2O 生成機構についての理論的研究、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。
18. ○花岡恭平、庄司光男、近藤大生、ヤンムンヨン、神谷克政、白石賢二、QM/MM 法による II 型 DNA トポイソメラーゼの DNA 再結合反応の解明、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。
19. ○近藤大生、花岡恭平、田口真彦、神谷克政、庄司光男、河合繁子、田口英樹、白石賢二、Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。
20. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇根成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一

浩、白石賢二, 光合成アンテナ部の光捕集機構についての理論的研究とそれをを用いた系外惑星における生命指標検出に向けての検討、第 3 回協定講座シンポジウム@神戸大学統合研究拠点、2012/11/29, ポスター。

21. ○田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇根成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二, 系外惑星における生命指標としての光合成色素についての理論的研究、第 5 回アストロバイオロジーワークショップ, 2012/11/23, 24, 口頭。
22. ○小松勇、梅村雅之、庄司光男、矢花一浩、白石賢二、神谷克政、栢沼愛、田口真彦、佐藤皓允、蘇根成, 系外惑星のバイオマーカー検出に向けた光合成アンテナ機構の励起状態計算、第 5 回アストロバイオロジーワークショップ, 2012/11/23, 24, 口頭。
23. ○M. Shoji, K. Hanaoka, D. Kondo, H. Umeda, M. Kayanuma, K. Kamiya, K. Shiraishi, S. Nakano, K. Katayanagi, QM/MM 法による同化型亜硝酸還元酵素の反応機構についての理論的研究, 第 50 回日本生物物理学会年会、名大, 2012/9/22。
24. ○花岡恭平・近藤大生・庄司光男・梁文榮・神谷克政・白石賢二 II 型 DNA トポイソメラーゼによる DNA 再結合反応に対する基質を介するプロトンリレー機構、第 6 回バイオ関連化学合同シンポジウム, 北大, 2012/9/6, ポスター。
25. ○花岡恭平、近藤大生、庄司光男、梁文榮、神谷克政、白石賢二、酵母 DNA トポイソメラーゼ II における DNA 再結合反応の理論的解明、第 12 回日本蛋白質科学会年会、名古屋国際会議場、2012/6/20, ポスター。
26. ○庄司光男、花岡恭平、近藤大生、梁文榮、梅田宏明、神谷克政、白石賢二、一酸化窒素還元酵素(NOR)における N2O 生成酵素についての理論的研究、第 12 回日本蛋白質科学会年会、名古屋国際会議場、2012/6/20, ポスター。
27. ○佐藤皓允、庄司光男、神谷克政、梅村雅之、矢花一浩、白石賢二、Theoretical Investigation of a Mechanism of Chirality Induction for Amino Acids in the Early Solar System, 日本地球惑星科学連合大会, 2012/5/24, 口頭。

<その他(発表等)>

1. 花岡恭平, Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の安定化機構の理論的解析, つくばソフトマター研究会 2013, 2013/3/11。
2. 田口真彦, 光合成アンテナ部の吸収スペクトルの理論的研究とそれをを用いた系外惑星における生命指標検出に向けての検討, つくばソフトマター研究会 2013, 2013/3/11。
3. 庄司光男, 生体酵素反応の理論的解明, つくばソフトマター研究会 2013, 2013/3/11。
4. Mitsuo Shoji, Computational Bioscience with Supercomputers、阪大タンパク研、セミナー, 2013/3/7(招待)。
5. 佐藤皓允、第 7 回夏の学校 宇宙ライフサイエンス若手の会、2012/8/25, ポスター発表。
6. 庄司光男、トレオニン合成酵素における反応制御機構の理論的解明, 第 4 回拠点シンポジウ

ム@秋葉原、2012/7/12。

(8) 著書、解説記事等

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

10. 社会貢献・国際貢献

1. Mitsuo Shoji, Computational Bioscience Utilizing Supercomputers: Performance and Applications, INc8 での CCS-Tsukuba の紹介、CCS-Tsukuba, 2012/5/11。
2. 庄司光男、花岡恭平、第 2 回つくば科学研究コンテスト、審査員、2013/3/20。
3. 庄司光男、将来展望ワークショップ@大阪大学、2012/10/20。
4. 庄司光男、CCS 見学会(富山県立富山南高等学校) 2012/10/17。

11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど