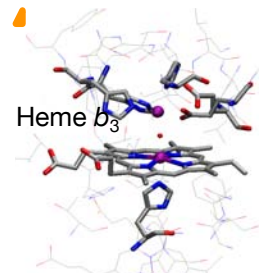
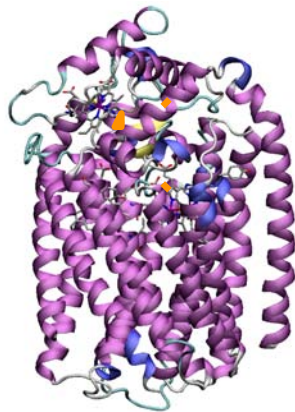


大規模分子シミュレーションによる 生命現象の解明

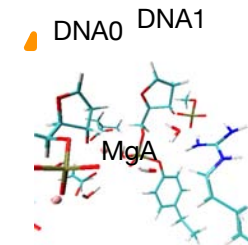
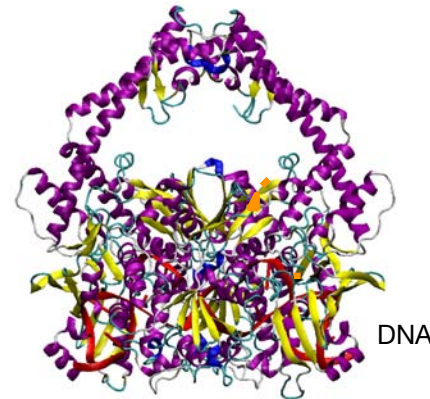
庄司光男
筑波大学計算科学研究センター

平成24年度学際共同プロジェクト
 生命システム解明のための大規模計算機シミュレーション
 庄司光男、筑波大・数理物質系

- Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) method
 - Molecular Dynamics (MD) simulations
- Nitric oxide reductase (NOR) [1]



Topoisomerase (Topo) [2]



Theoretical study on a calculation method of electron transfer coupling matrix (T) [3]

学会発表32件
 (ポスター25件, 口頭7件
 /国内25件、国際7件)

[1] M. Shoji et al, Mol. Phys. Accepted 2013.

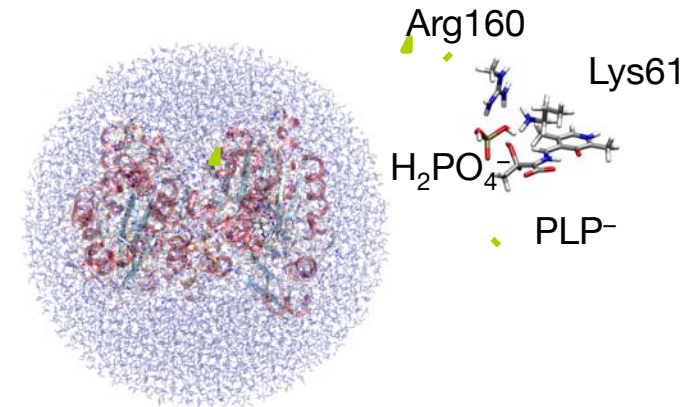
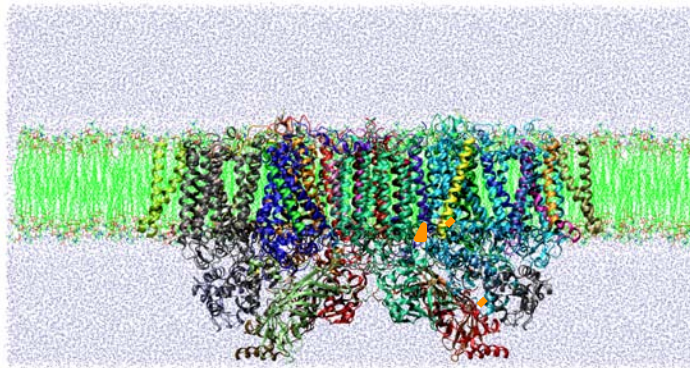
[2] K. Hanaoka et al, J. Bio. Struct. & Dyn., Accepted 2013.

[3] M. Shoji et al, Int. J. Quantum Chem., 113, 342 (2013).

平成25年度学際共同プロジェクト 生体システムにおける動作原理の理論的解明

庄司光男、筑波大・数理物質系

- Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) method
Oxygen Evolving Complex in Photosystem II [1] Threonine Synthase [2]



- Molecular Dynamics (MD)@HA-PACS
Long time (64 μ s) simulations for a Nuclear Receptor (Vitamin D) [3]
- Development of GPU codes (○梅田,塙,庄司,朴)
GPU code for HF calculation in openFMO [4]

学会発表17件(招待5件)

- [1] M. Shoji, et al, Catal.Sci.Technol,3,1831.
[2] M. Shoji et al., 投稿中
[3] K. Hanaoka et al, 投稿中
[4] 梅田ら、. 情報処理学会論文誌2013.

Theoretical investigation on the conformation-charge relationship of the photosystem II oxygen evolving complex (PSII-OEC)

○Mitsuo Shoji,¹ Hiroshi Isobe,² Shusuke Yamanaka,³
Jian-Ren Shen,² Kizashi Yamaguchi³

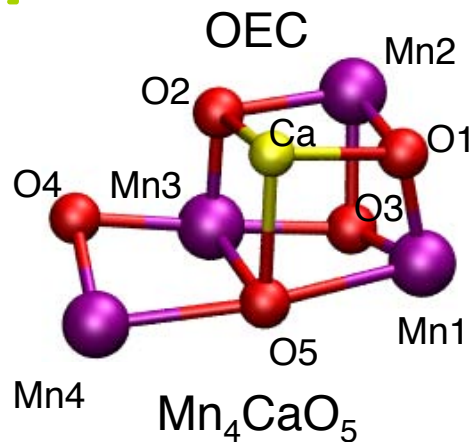
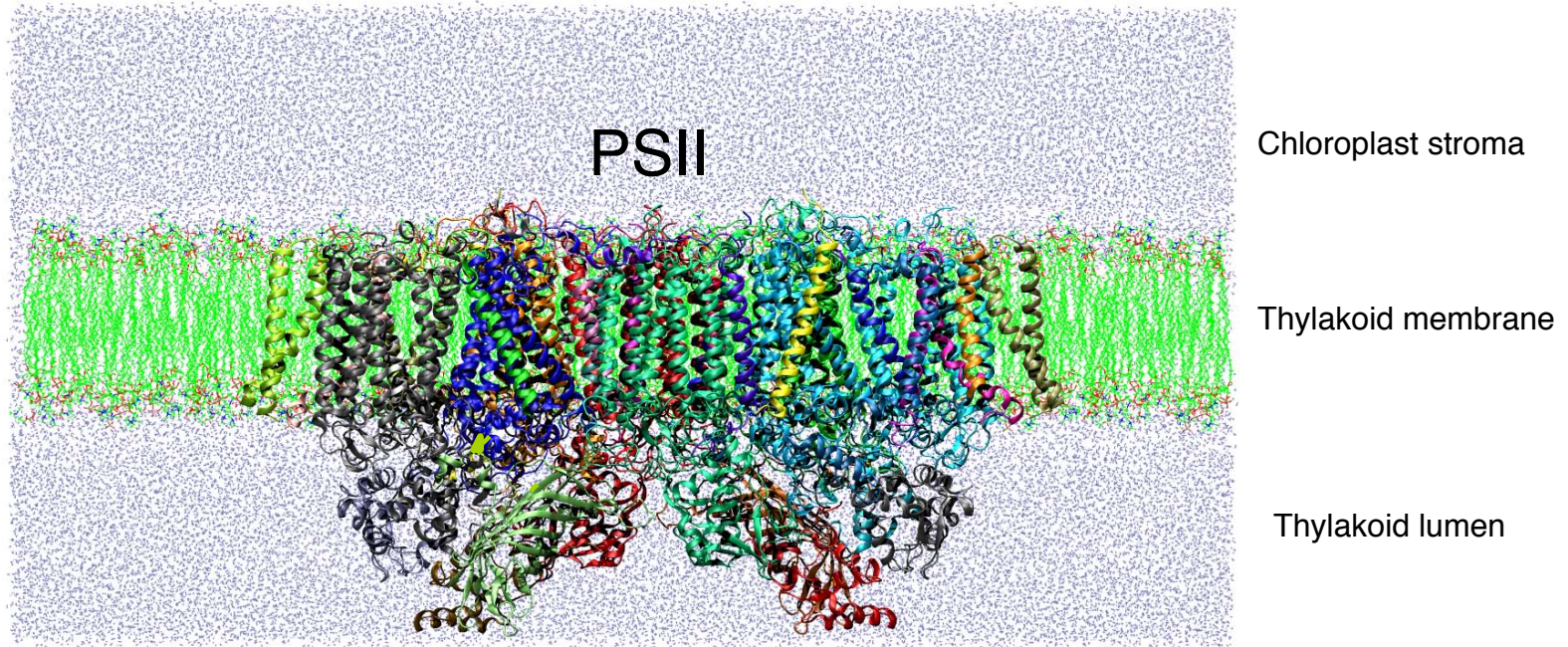
¹ Grad. Sch. of Pure & App. Sci., Univ. Tsukuba

² Grad. Sch. Nat. Sci. & Tec., Okayama Univ.

³ Grad. Sch. Sci, Osaka Univ

mshoji@ccs.tsukuba.ac.jp

Photosystem II (PSII) and Oxygen-evolving complex (OEC)

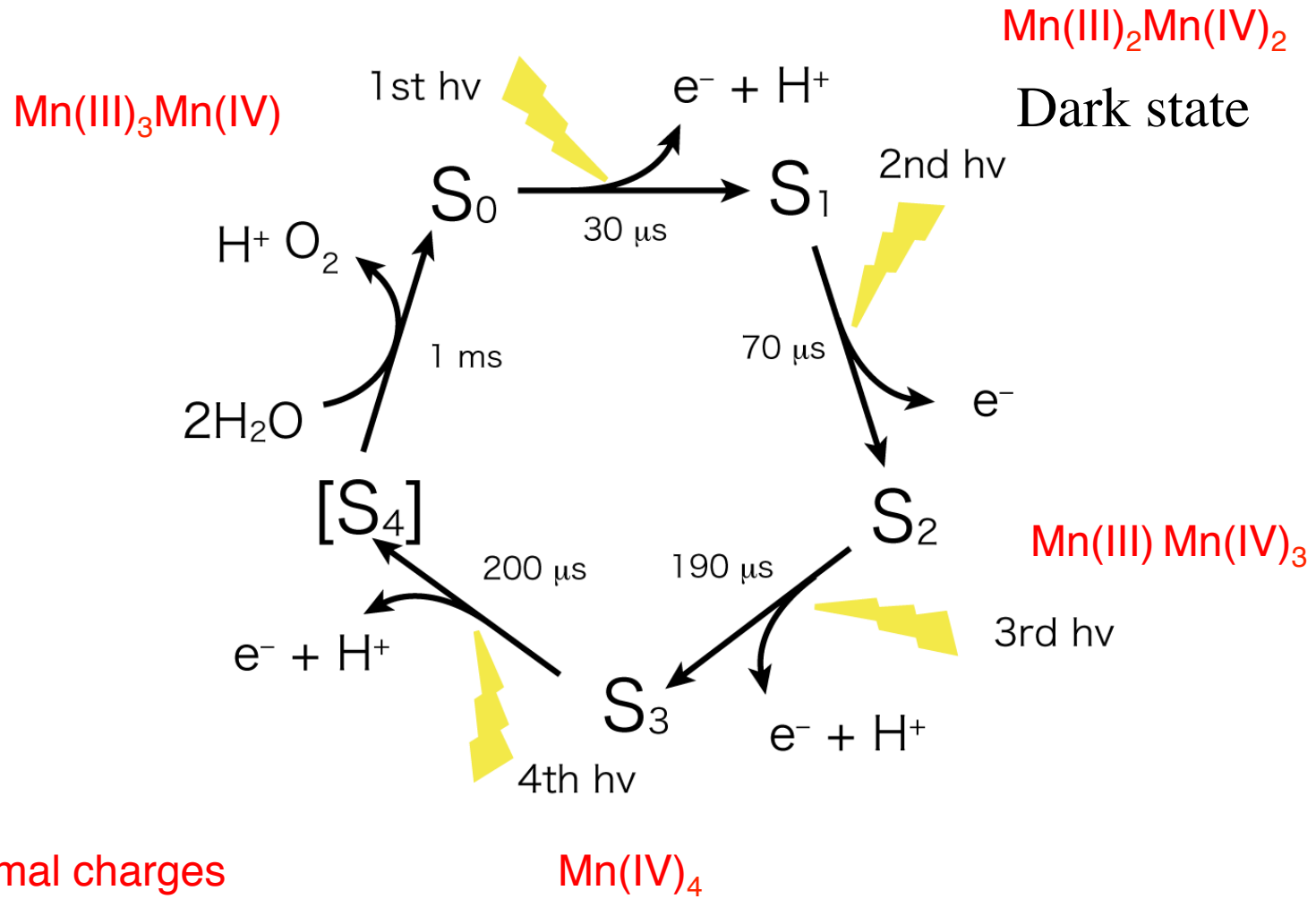


- OEC reaction: $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$

- A 1.9Å resolution X-ray structure of PSII was solved [1].
- Clear OEC structure and surrounding water molecules were identified.

[1] Y. Umena, K. Kawakami, J-R. Shen, N. Kamiya, nature 473, 53 (2011).

Kok cycle



Spectroscopies

EPR

- ESR signals
 - S_0 : MLS($g=2$, $S=1/2$)
 - S_2 : MLS($g=2$, $S=1/2$), $g=4$ or 6-10 ($S=5/2$)
 - difficulties for the Mn(III) magnetic anisotropy

ENDOR

- Number of different H atoms
- Water exchange

FTIR

- Hydrogen bond changes

EXAFS

- Distances between heavy atoms (Mn-O, Mn-Mn, Mn-Ca)

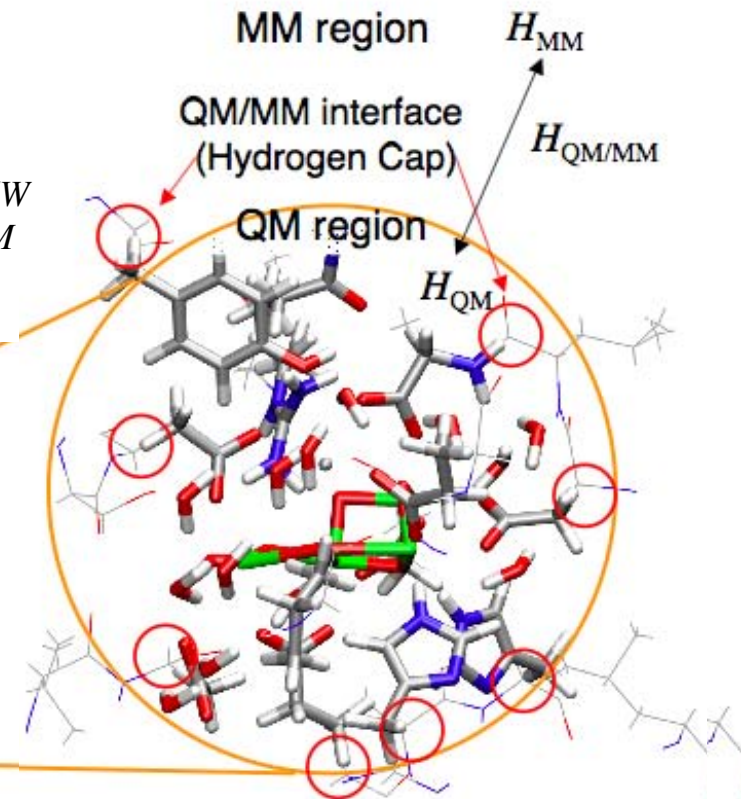
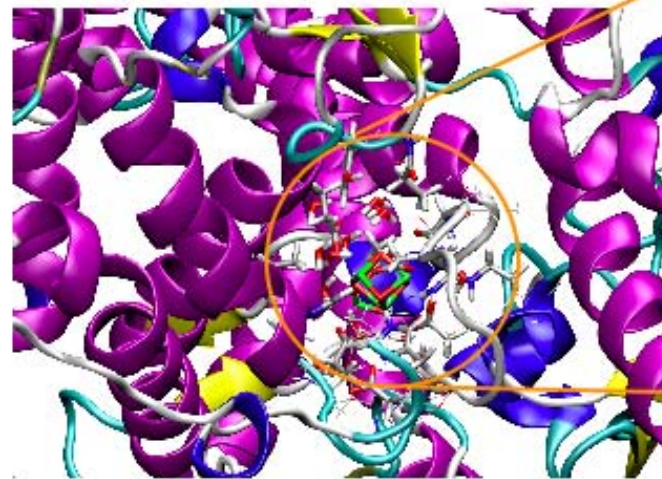
QM/MM

$$H_{\text{system}} = H_{\text{QM}} + H_{\text{QM/MM}} + H_{\text{MM}}$$

$$H_{\text{QM}} = \sum_i^e \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \sum_{\langle i,j \rangle}^{N_e, N_e} \frac{1}{r_{i,j}} - \sum_{i,a}^{e, N_{\text{QM}}} \frac{Z_a}{r_{i,a}} - \sum_{i,q}^{e, N_{\text{MM}}} \frac{Z_q}{r_{i,q}} + \sum_{\langle a,b \rangle}^{N_{\text{QM}} N_{\text{QM}+MM}} \frac{Z_a Z_b}{r_{a,b}}$$

$$H_{\text{QM/MM}} = V_{\text{QM/MM}}^{\text{bonded}} + V_{\text{QM/MM}}^{\text{vdW}}$$

$$H_{\text{MM}} = T_{\text{MM}} + V_{\text{MM}}^{\text{bonded}} + V_{\text{MM}}^{\text{coulomb}} + V_{\text{MM}}^{\text{vdW}}$$



まとめ

- スーパーコンピュータを活用する事で生体分子シミュレーションにおける大規模かつ精密計算が可能となってきた。
- 実験結果と良く対応させる事が可能となってきた。
- 計算機シミュレーションは生体システムの解明と応用に今後、重要な役割を果たせる