

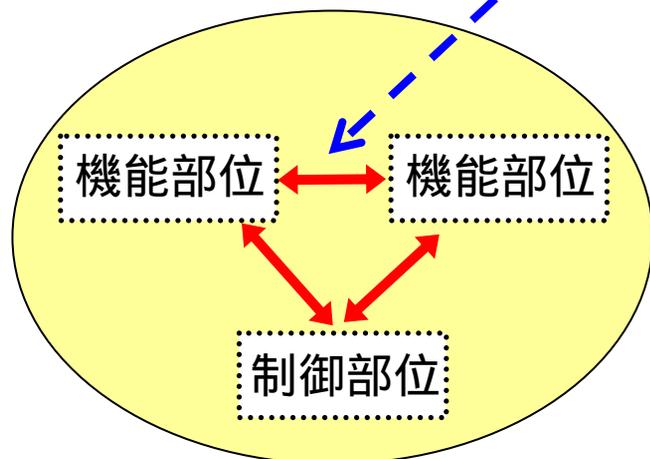
PetaFlopsコンピュータを駆使するための戦略
生命科学におけるターゲットは何か？
～ シトクローム酸化酵素 ～

筑波大学 計算科学研究センター
神谷克政

京速計算機に対する戦略：ターゲットが重要

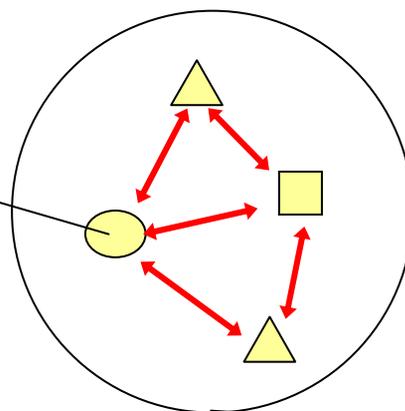
タンパク質分子の全体を解析することが可能になると。。。

→タンパク質分子内の**コミュニケーション**のしくみを調べる
ことができる



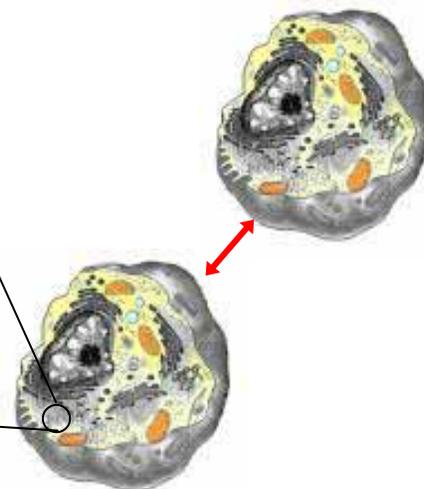
タンパク質内

量子構造生物学



タンパク質間

システムバイオロジーなど



細胞間

具体例：細胞内呼吸

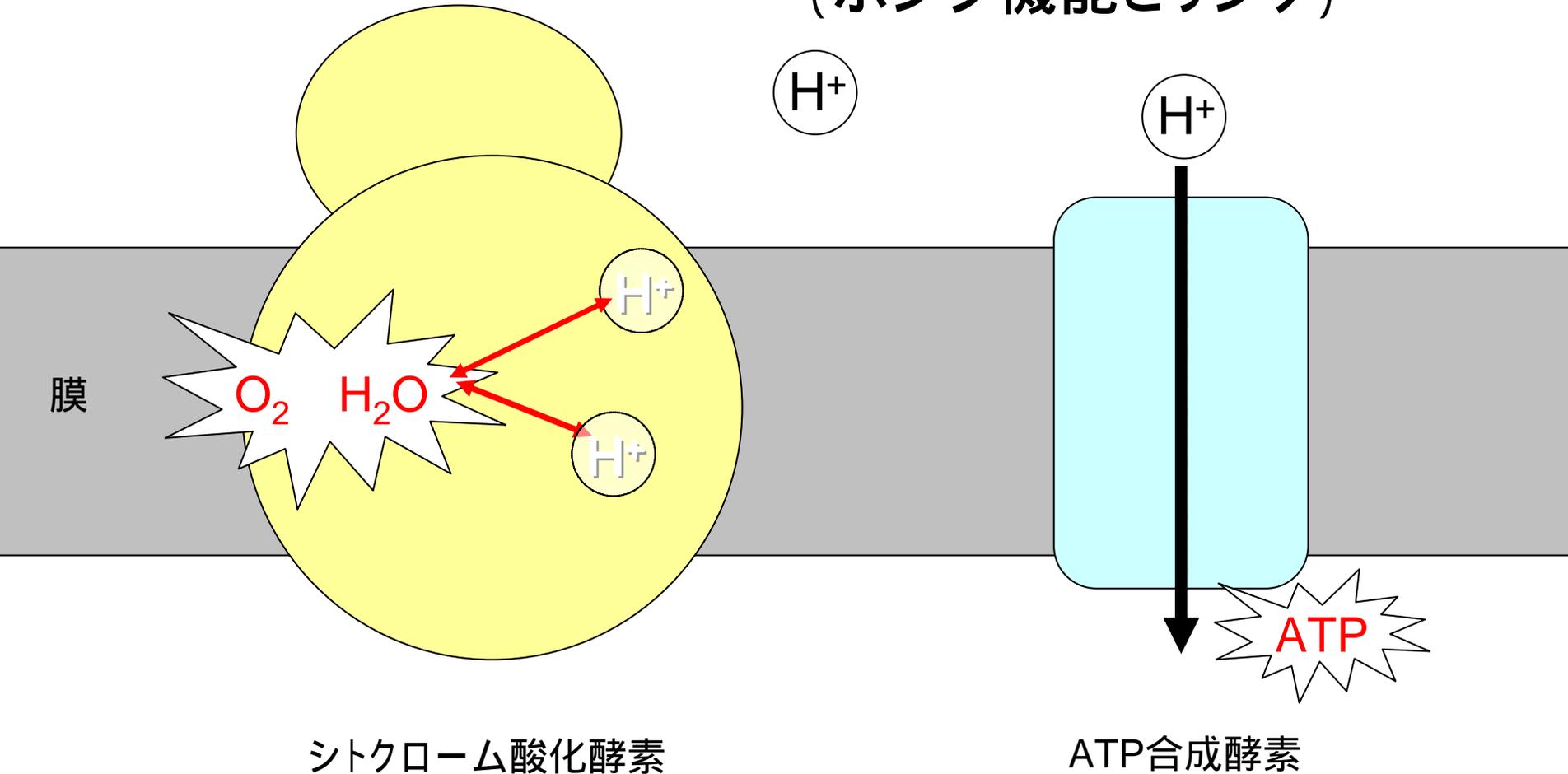
酸素還元

と

H⁺移動

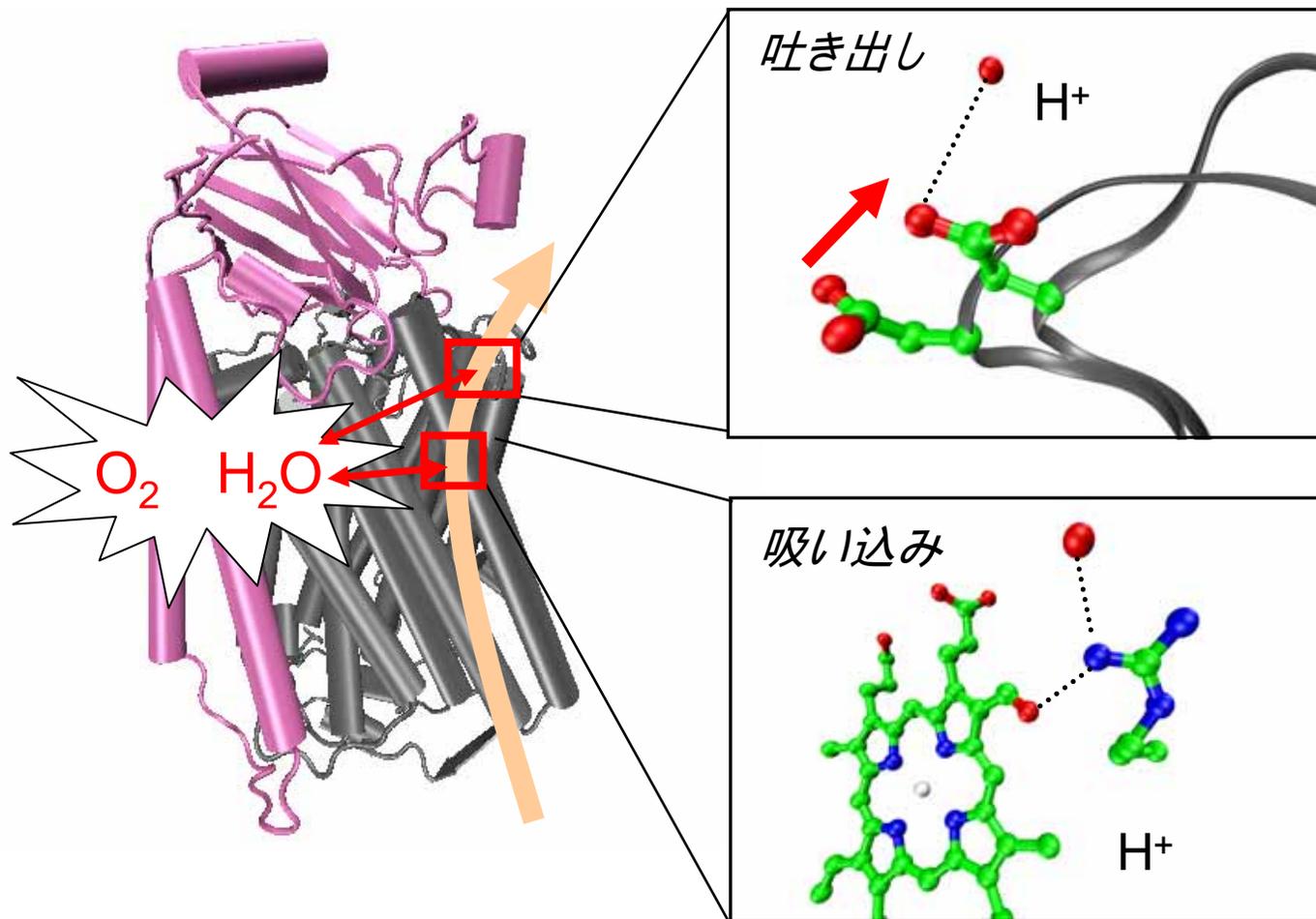
の両経路間の

コミュニケーション → 電子移動フローの制御
(ポンプ機能とリンク)



PetaFlopsコンピュータによる 原子・電子レベルの解析

実験と計算・理論との間のキャッチボールを本質的に実現する

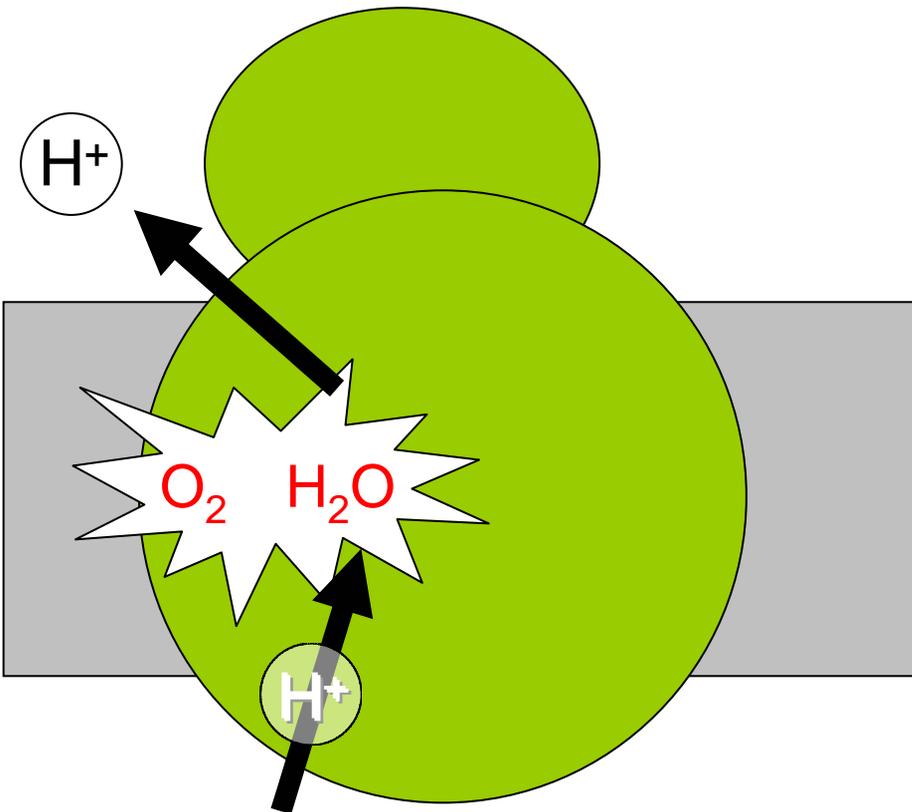


タンパク質の分子進化と機能発現機構

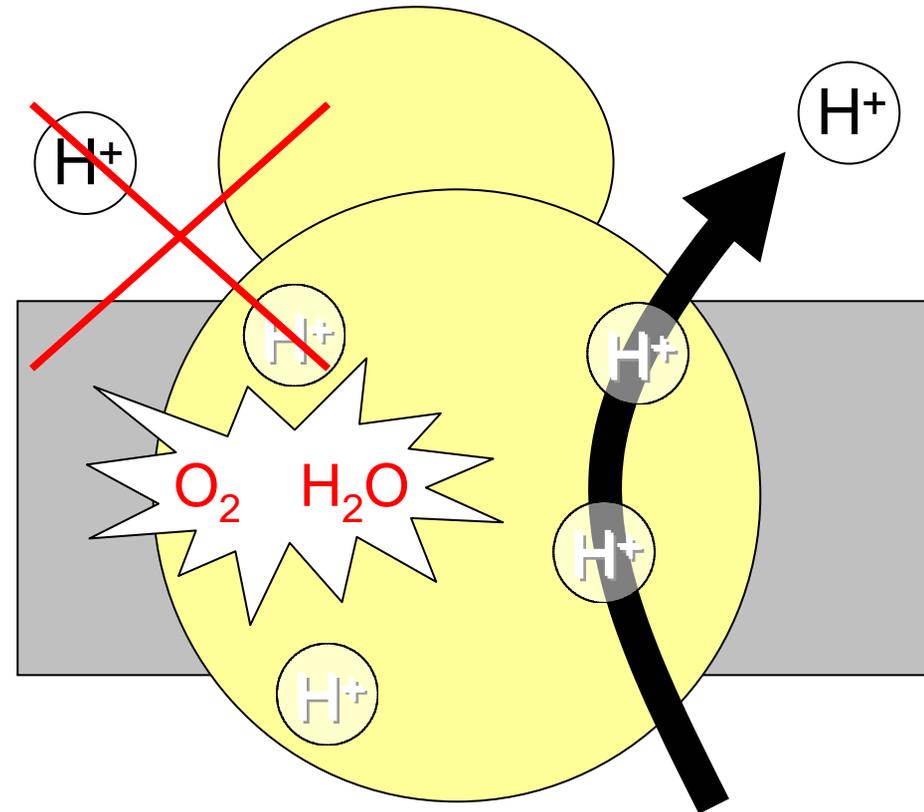
シトクローム酸化酵素は、ほぼすべての生物が有する。

しかし、その機能の発現機構には、**生物種間で違いがある**

- 進化による新しい機構の獲得
- 生命工学的応用への可能性



バクテリア

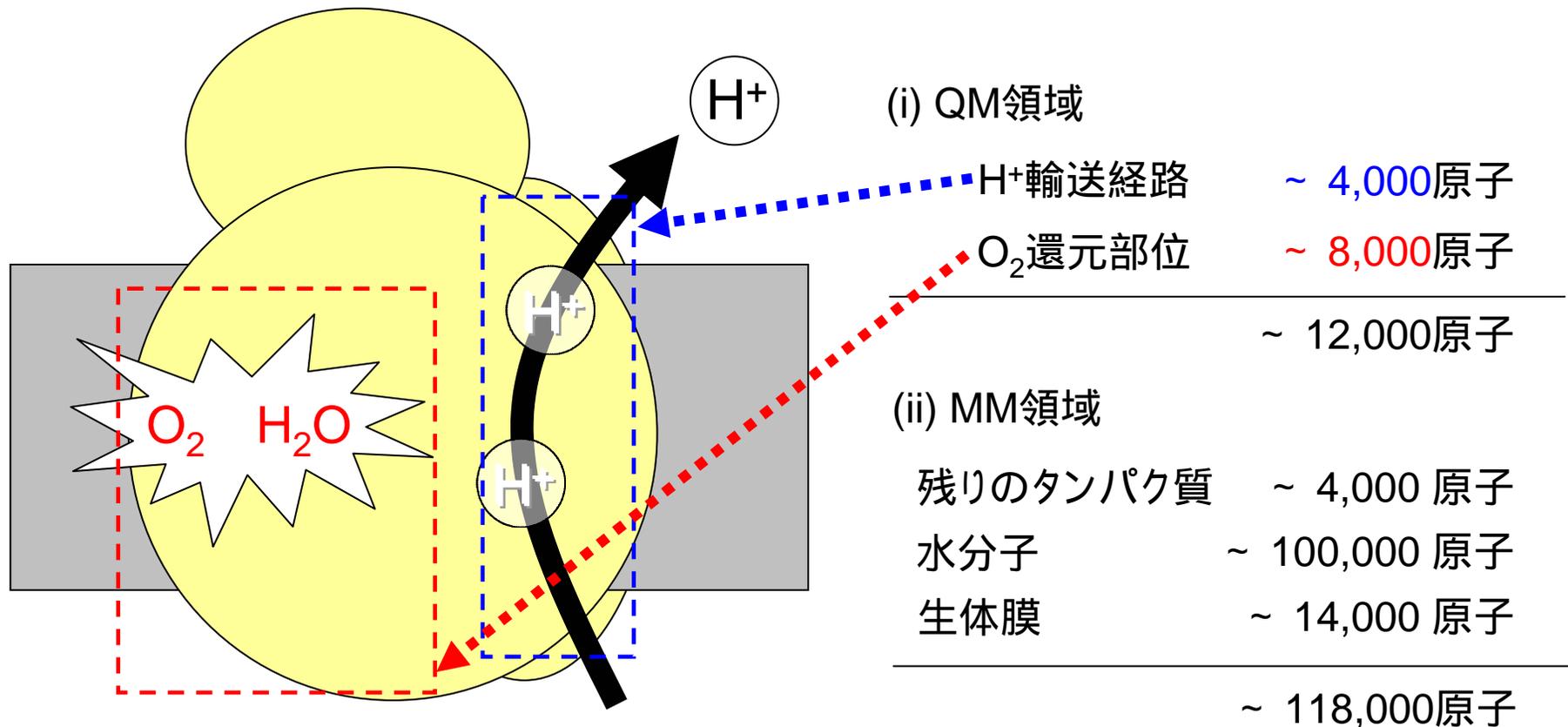


真核生物

PetaFlopsコンピュータを駆使するための戦略

QM/MM ハイブリッド分子動力学と計算モデル

シトクローム酸化酵素 + 溶媒(水) + 生体膜 = 約**13万**原子
→ 機能発現機構の解析へ (QMは約1万个)



シトクローム酸化酵素