

クラウドVRを用いた分子設計共創環境 (CCE)

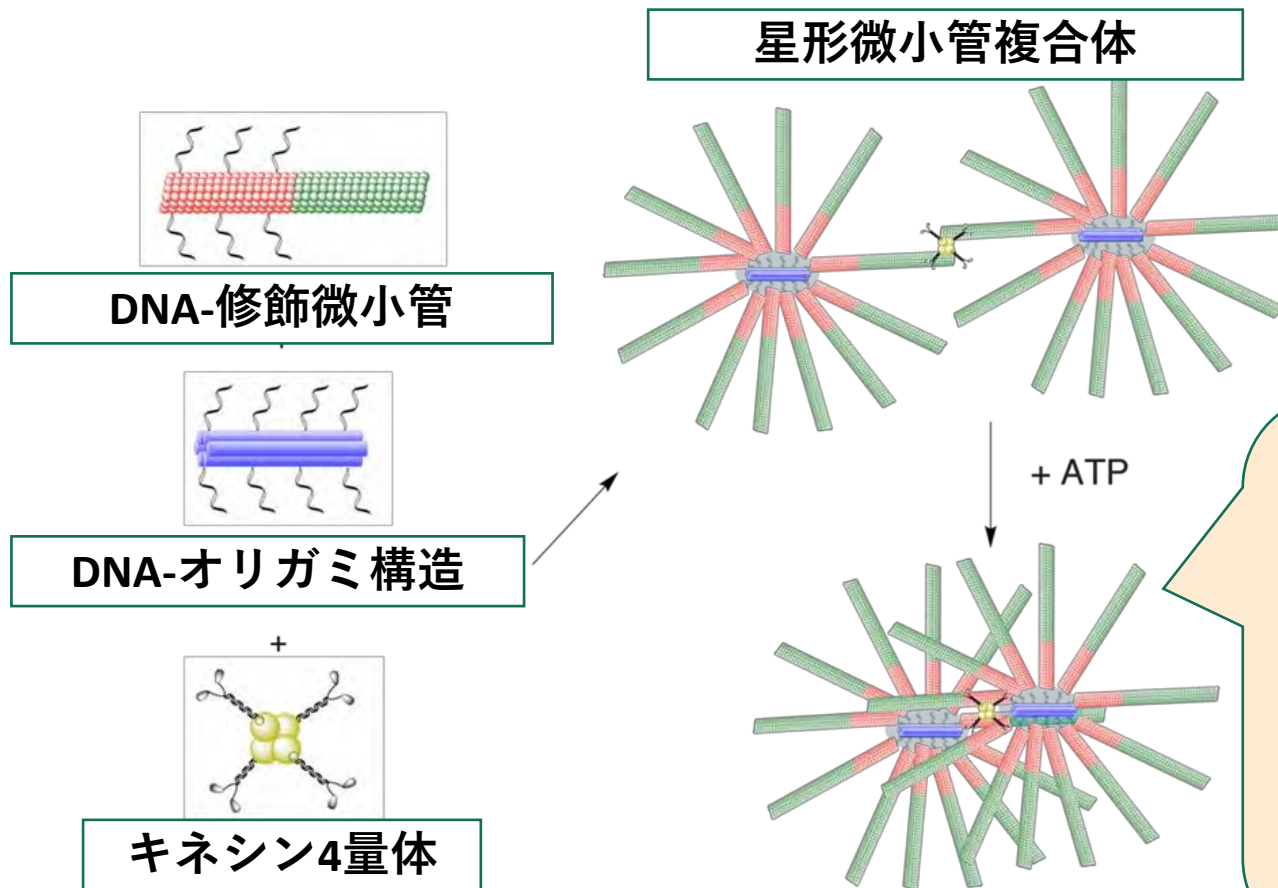
小長谷 明彦

代表取締役

株式会社分子ロボット総合研究所

- **生体分子における分子モデリングの課題**
- **“触れる” 仮想分子モデル**
- **VRクラウド 共創環境**

生体分子における分子モデリングの課題

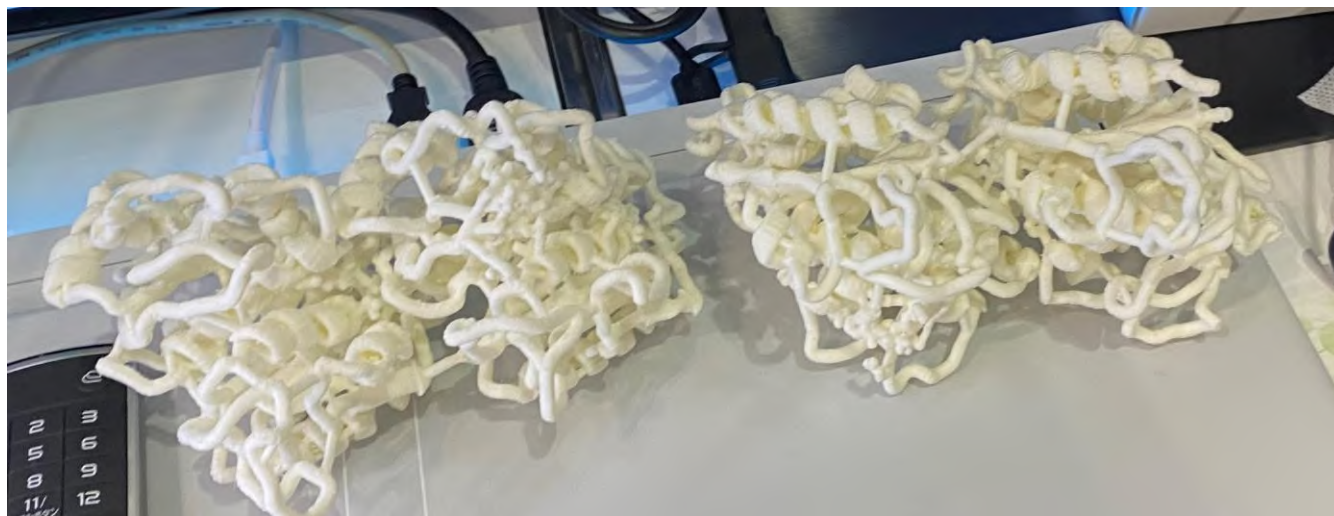


イメージしやすい、ただし、構造情報が欠如

Artificial Smooth Muscle Model
(A. Kakugo, Nano Letters 2019)

3D 分子構造モデル

3Dプリンタで作成したチューブリン2量体



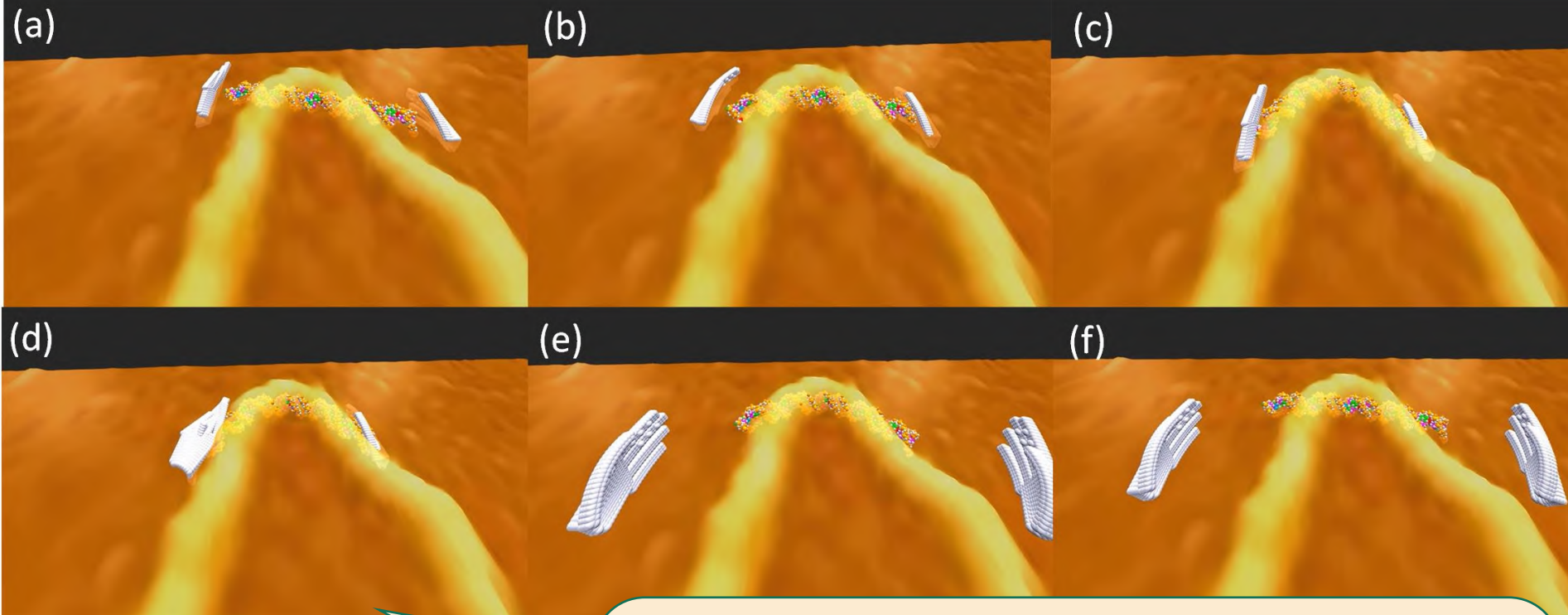
触れるが
コンピュータで
処理できない

キネシン4量体原子モデル

Alpha-Fold 2による立体
構造予測

コンピュータ
で処理可能、
でも触れない

触れる仮想分子(DNA 二重らせん)



- DNAの弾性はどのくらい？
- 裂け目は入るのか？
- 配列依存性は？

触れる仮想分子(チューブリン 2 量体)

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

- GTP をGDPにしたら?
- 水素結合の影響は?
- 隣にチューブリン 2 量体を置いたら?

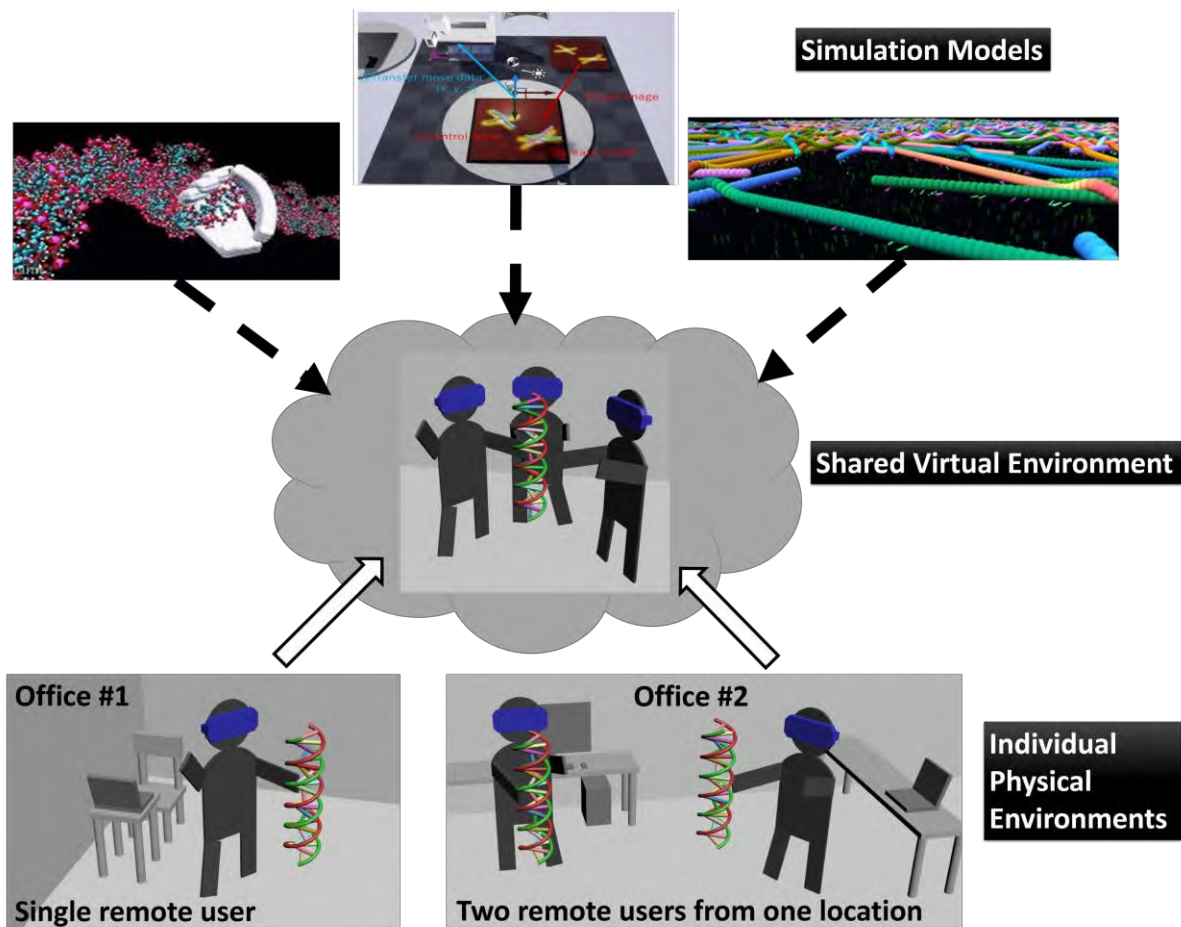
VRシミュレーション上で観測した現象はすべて 仮説

様々な背景からの議論が
不可欠

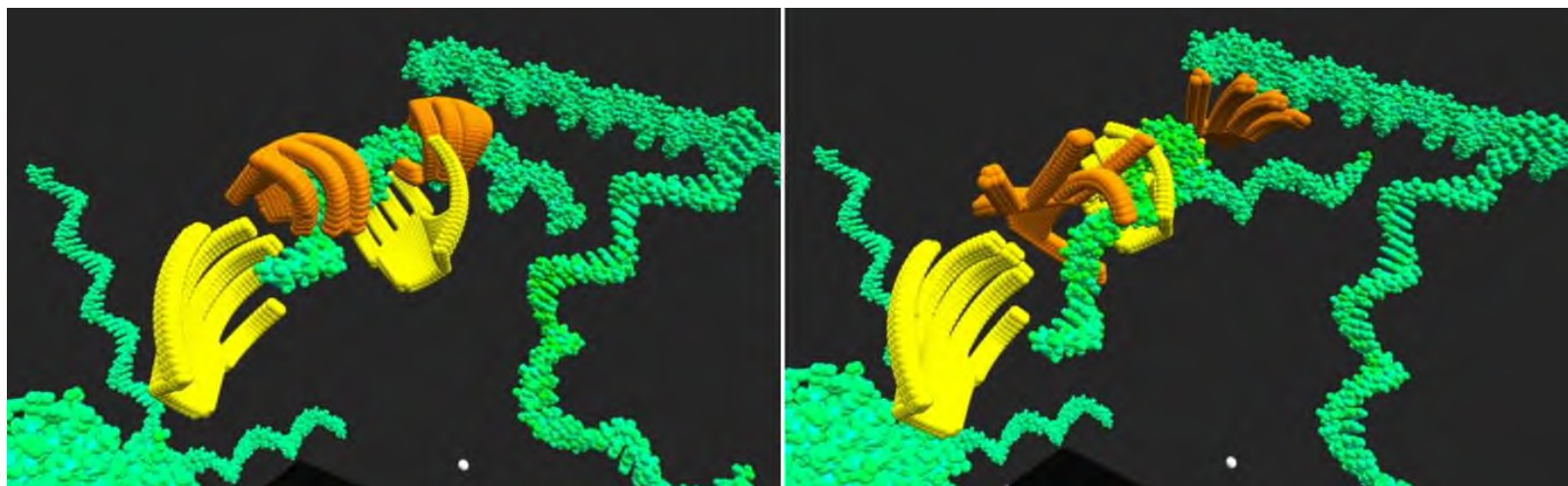


- 生化学
- 生物物理
- 分子設計
- 分子シミュレーション
- 他

VRクラウド 共創環境(CCE)



クラウドVR上での共創



まとめ

- 生体分子モデリングのための新しいVRプラットフォーム
- 直観的で自然な仮想分子の操作を実現
- VR上で仮説生成⇒実験で検証
- LAN/Cloud上のGPUマシンで稼働

ご清聴ありがとうございました

info@molecular-robot.com

株式会社分子ロボット総合研究所