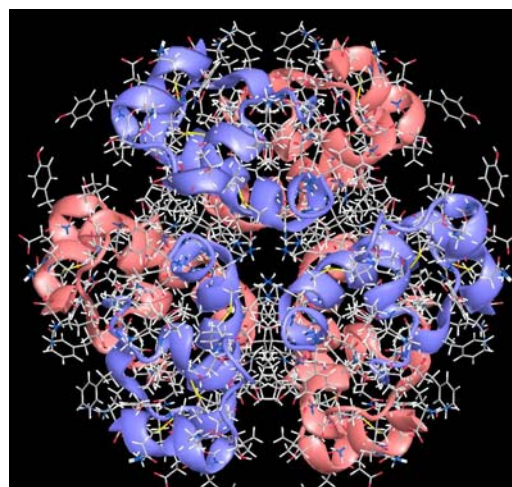


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-1. シミュレーション
小項目	3-1-10. タンパク質量子化学計算

概要（200字以内）

量子力学による精密なタンパク質全電子計算が図のインスリン6量体（アミノ酸506個）で達成された。現在のコンピュータの発達から予測すると20~30年後にはタンパク質の反応シミュレーションが自由にできるようになる。細胞内のDNA発現や酵素反応ネットワークのダイナミック・シミュレーションが実現され、がん細胞抑止など各種の薬剤の設計ができるようになる。また、植物の光合成系にならった高効率の太陽電池の開発により抜本的な地球温暖化対策が現実のものになる。



現状と最前線

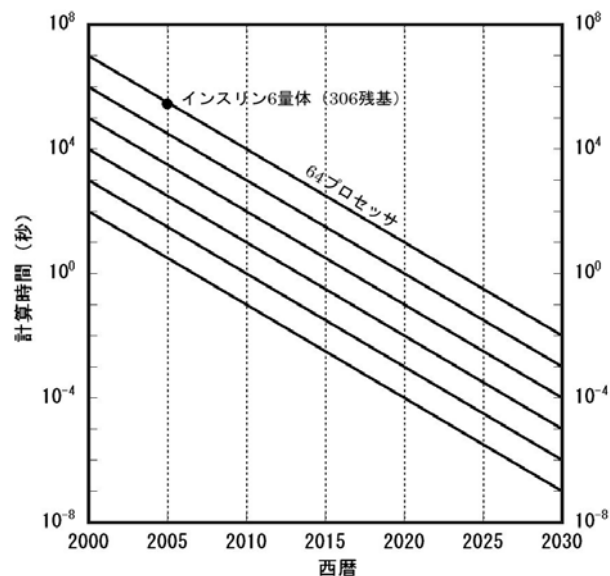
精密なタンパク質量子化学計算には現在2つの方法がある。(1)筆者らが開発した密度汎関数法コーン・シャム方程式のQCL0法[1]、(2)北浦、中野らによるフラグメント分子軌道法[2]である。いずれもわが国で初めて開発され世界をリードしている計算方法である。(2)は1種の局在化分子軌道法で計算はきわめて高速でより実用的であるが、タンパク質全体が関与する現象に対応できないという限界がある。(1)と(2)の利点を組み合わせることも可能である。

密度汎関数法は半導体素子の設計などで実用化している方法であり、筆者らがタンパク質向けのQCL0法を研究し、ProteinDFというプログラムを開発した。このプログラムは、文部科学省の「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト」により佐藤を中心に発展を続け、一般に公開されている。

2000年にシトクロムc（104アミノ酸残基）の計算が達成され、2005年に上記のインスリン6量体（306残基）が計算され、1~2年のうちに1000残基の計算が実現する見込みである。これまでに数十種のタンパク質の計算がされ、その結果がデータベースに蓄積されている。

インスリン6量体の計算には64プロセッサの並列計算機で77時間かかっている。これを基準にして将来のタンパク質の計算時間を予測したのが次頁のグラフである。ここ数十年、コンピュータは10年で100倍高速化している。それに計算方法やソフトウェア技術の改良を加えると10年に1000倍の高速化になる。

グラフの1番上の斜め線は64台のプロセッサを使った場合のインスリン6量体の計算時間の予測である。2030年には100分の1秒で計算できることを示している。1番下の斜め線は640万台の並列計算機を用いた計算時間で、2030年に1秒間に1千万回計算できることを示している。すなわち、密度汎関数法で精密な分子動力学計算ができるということである。



この時代になるとタンパク質の反応シミュレーションが自由にできるようになり、細胞内のDNA発現や酵素反応ネットワークのダイナミック・シミュレーションが実現する。その結果、がん細胞抑制剤や分子マシン、分子コンピュータの設計ができるようになるだろう。植物の光合成システムにならった高効率の太陽電池が開発され、地球温暖化に対する抜本的な解決策になるだろう。

地球温暖化対策は急がなければならない。この目的だけのためにも人材と大規模なコンピュータ資源を投入して、化石燃料に依存しないエネルギー生産方法を開発しなければならない。

文献

[1] 柏木 浩、佐藤文俊・監修：「タンパク質量子化学計算—ProteinDFの夢と実現」, アドバンスソフト(2004).

[2] K. Kitaura, E. Ikeo, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi: “Fragment Molecular Orbital Method: An Approximation Computational Method for Large Molecules “, Chem. Phys. Lett., 313 (1999) p. 701.

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

タンパク質の化学反応シミュレーションのための計算科学者の研究開発チームを組織すること。ペタフロップス・クラスのコンピュータを上記の目的のために投入すること。

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

高効率の太陽電池の開発、およびがん抑制剤などの開発のため計算科学者と実験科学者の研究開発チームを組織すること。

キーワード

タンパク質量子化学計算、密度汎関数法、QCLO法、フラグメント分子軌道法、DNA、酵素反応ネットワーク、がん抑制剤、高効率太陽電池、エネルギー生産

(執筆: 柏木 浩)