

26L-pm01

創薬研究のための実験融合構造解析シミュレータの開発

○高羽 洋充¹, 鈴木 愛², サヌーン リアド¹, 古山 通久³, 坪井 秀行¹,
畠山 望¹, 遠藤 明¹, デルカルピオ カルロス¹, 久保 百司¹, 西島 和三⁴,
宮本 明^{1,2} (¹東北大院工, ²東北大未来セ, ³九州大稲盛セ, ⁴持田製薬)

【目的】タンパク質の構造と機能を理解するためには、測定技術の進歩とともに計算化学の援用が必要不可欠である。そこで本研究では、実験融合シミュレーション手法の確立をめざして、タンパク質を取り扱うための超高速化量子分子動力学プログラムを開発した。さらに、本プログラムで、非経験的に巨大分子の3次元構造を描き出し、その構造に対して、X線回折(XRD)、中性子回折(ND)、赤外吸収スペクトル(IR)などの各種測定データを模擬できる機器分析シミュレータを開発した(下図参照)。発表では、本シミュレータの詳細と、実験融合計算化学を指向した応用例について報告する。

【方法】開発したシミュレータの核となる量子計算は当研究室で開発した Colors をベースとした。

【結果】Colors で最適化された様々な構造体(タンパク、液体)の計測シミュレーション結果は実験データをよく再現し、本シミュレータによって微細構造を理論的に解析できることが明らかにされた。

