

分野名: ナノ

溶液内タンパク質の電子状態の 3D-RISM/FMO法による解析

■ プログラム名: RISM/3D-RISM

■ 開発

□ 自然科学研究機構分子科学研究所 教授 平田文男

■ 概要

- 酵素反応を考えるには反応関与物質の電子状態、溶媒和構造、および自由エネルギーを求めることが必要。
- 溶液内の蛋白質の全電子状態計算
- 溶液分布を求める統計力学手法(3D-RISM)と大規模分子の量子化学計算アルゴリズム(FMO)との連成計算

■ アルゴリズム

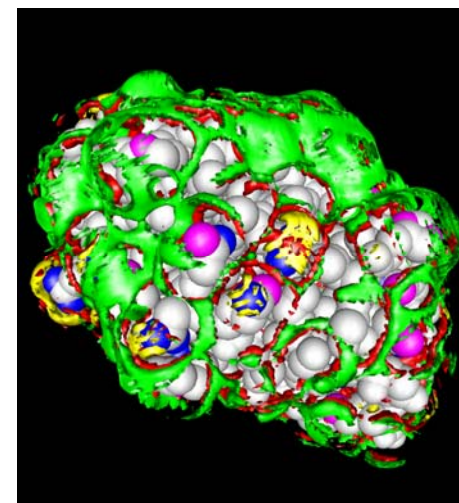
- FORTRAN77/90
- 3D-RISM: 3次元高速フーリエ変換の並列化
- FMO: 蛋白質を2~3残基のフラグメントに分割し、各フラグメントごとに並列計算

■ 現状での計算規模

- 3D-RISM 格子点数 $512 \times 512 \times 512 \times 2$
- 蛋白質サイズ: 250 残基 (3 千原子・3 万基底)
- メモリ容量 60 GB (一点計算)

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 3D-RISM 格子点数 $1024 \times 1024 \times 1024 \times 4$
- 蛋白質サイズ: 1000 残基 (1 万原子・10 万基底)
- メモリ容量 600 GB (酵素反応座標上の各点での計算)



リゾチーム周りの水とイオンの分布

■ どんなことが期待されるか?

- 3D-RISM/FMO により酵素反応の詳細を第一原理的に明らかにする。
- 効率の良い反応条件の選定や、新規反応経路の発見を目指す。
- 蛋白質のミュータントについても酵素反応を予測することで、反応効率の高い新型酵素の開発に発展させる。