

タンパク質の電子状態計算
Electronic state calculation of proteins

東京大学 生産技術研究所 機械・生体系部門 平野 敏行

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して、タンパク質の電子状態計算を行い、理論化学的手法によりタンパク質の物性・反応性を理解することを目的としている。

使用するプログラムは自らが開発している量子化学計算プログラム ProteinDF である。ProteinDF は、QM/MM 法や FMO 法・分割統治法などと異なり、計算領域を分割することなく、金属を含むタンパク質のカノニカル分子軌道計算を達成できる点が特長である。ProteinDF のコードは C++ で記述され、MPI/OpenMP によるハイブリッド並列計算を行うことができる。

タンパク質の電子状態計算を達成するためには、高精度な初期値を作成することも重要である。そこで擬カノニカル局在化軌道(QCLO)法を利用した自動計算 Python プログラム QCLObot を開発している。QCLObot では、YAML フォーマットで用意した計算シナリオに基づき、適宜サブユニットの作成・末端処理を行い、QCLO を作成して巨大分子の電子状態計算を達成することができる。最近では、PDB から得られたタンパク質構造から、水素付加や構造緩和を行い、量子化学計算に耐えうる分子構造のモデリングを行う機能も追加している。

本年度は計算環境の構築、テスト計算を行った。ProteinDF や QCLObot ならびに Python モジュールなどを利用した関連ツールは github をはじめとするインターネット上で管理されており、それら最新パッケージの取得およびビルドに手間取ってしまった。今後、いくつかの小規模タンパク質のテスト計算からはじめ、電子状態計算の事例を増やしていきたい。