

スーパーコンピュータを活用した薬開発

藤谷 秀章

東京大学 先端科学技術研究センター

疾患標的タンパク質と薬分子が水中で結合する動的振る舞いを、ミクロな物理法則に基づく方法でシミュレートし、親和性(結合自由エネルギー)を精度良く求めて薬設計に活用することは創薬分野における永年の課題である。1997年に Jarzynski が発見した自由エネルギー差 ΔG と二つの熱平衡状態間の非平衡仕事量 W との関係式を用いて、分子動力学計算からタンパク質と薬分子の結合自由エネルギーを算出する MP-CAFEE 法 (Massively Parallel Computation for Absolute Binding Free Energy) を開発した。また最新の量子力学分子軌道計算法を用いて高精度分子力場(FUJI Force Field)を開発した。これらの理論的な研究成果に基づき、最新のスーパーコンピュータを活用することで新しいIT 創薬の実用化を進める。