



# 2013年ノーベル化学賞 から考える新しい科学のカタチ。

大阪大学大学院  
理学研究科生物科学専攻修士2年  
秋定朋宏



# ノーベル賞クイズ

- 第一問

ノーベル賞はいくつあるでしょうか？



## 医学生理学賞

細胞内の輸送系の研究で米国のジェームズ・ロスマン (James Rothman) 氏とランディ・シェックマン (Randy Schekman) 氏、ドイツのトーマス・スードフ (Thomas Suedhof) 氏の3氏に贈られることが決まった。

## 物理学賞

「神の粒子」と呼ばれる「ヒッグス粒子 (Higgs Boson)」を理論化した英国のピーター・ヒッグス (Peter Higgs) 氏とベルギーのフランソワ・エンゲレル (Francois Englert) 氏の2人に授与すると発表した。

## 化学賞

化学プロセスを予測、理解するために使われているコンピューターシミュレーションを考案したマーティン・カープラス (Martin Karplus) 氏、マイケル・レビット (Michael Levitt) 氏、アーリエ・ウォーシェル (Arieh Warshel) 氏の3人に授与すると発表した。

選考委員会は、「複雑な化学システムのためのマルチスケールモデルの開発」に対して賞を授与すると述べた。(c)AFP

## 文学賞

カナダの女性小説家アリス・マンロー (Alice Munro) 氏 (82) に授与すると発表した。

## 平和賞

シリアの化学兵器全廃に向け査察団を派遣している「化学兵器禁止機関」に授与すると発表した。

## 経済学賞

資産市場の動向予測で画期的な業績を上げた米国のユージン・ファマ (Eugene F. Fama) 氏、ラース・ハンセン (Lars Peter Hansen) 氏、ロバート・シラー (Robert J. Shiller) 氏の3人に授与すると発表した。



- 第二問

これまでの日本人受賞者は？



○物理学賞

湯川秀樹、朝永振一郎、江崎玲於奈、小柴昌俊、小林誠、益川俊英

○化学賞

福井謙一、白川英樹、野依良治、田中耕一、下村脩、鈴木章、根岸英一

○医学生理学賞

利根川進、山中伸弥

○文学賞

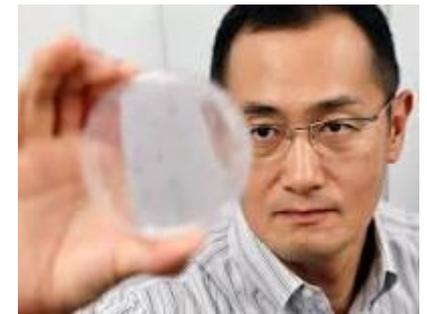
川端康成、大江健三郎

○平和賞

佐藤栄作

○経済学賞

なし



18名

**大阪大学出身者  
なし**

# 2013年ノーベル化学賞受賞テーマ



"for the development of multiscale models for complex chemical systems"

「複雑な化学システムのマルチスケールモデル開発」



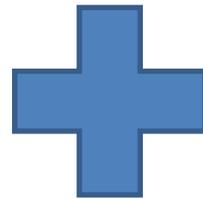
[マーティン・カープラス](#) (仏ストラスブール大学)、[マイケル・レビット](#) (米スタンフォード大学)、[アリー・ワーシェル](#) (米・南カリフォルニア大学)

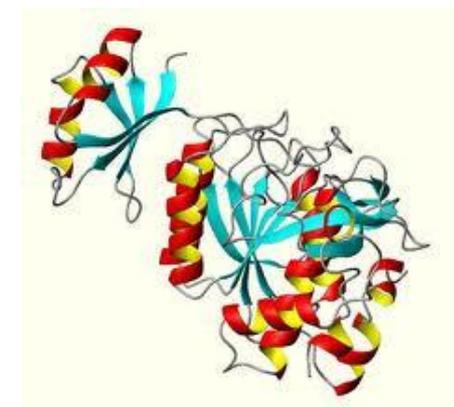
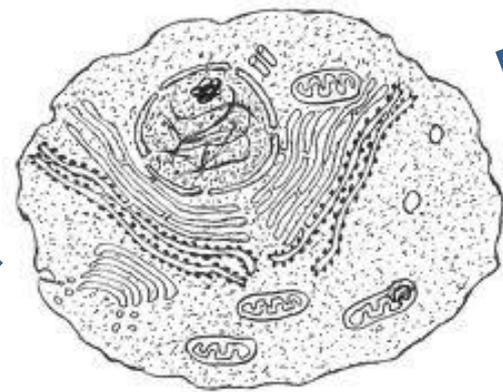
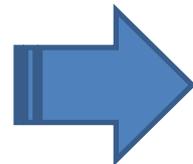


# 「複雑な化学システムのマルチスケールモデル開発」



タンパク質や生体分子の振る舞いをコンピュータで計算し  
シミュレーションする方法を開発した



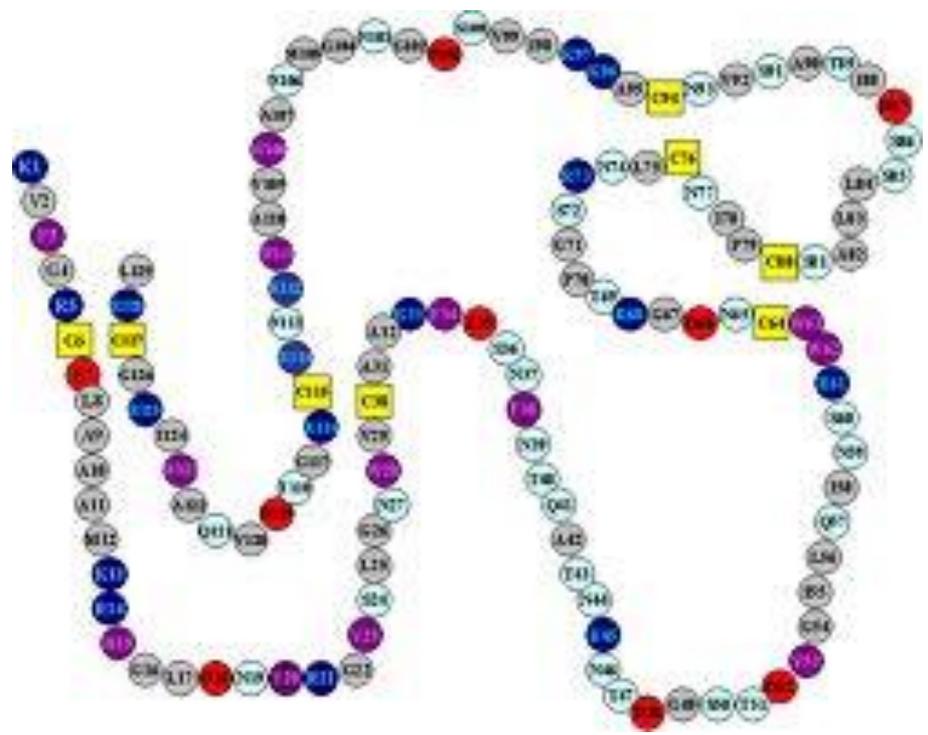
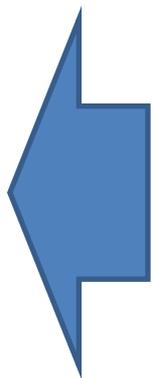
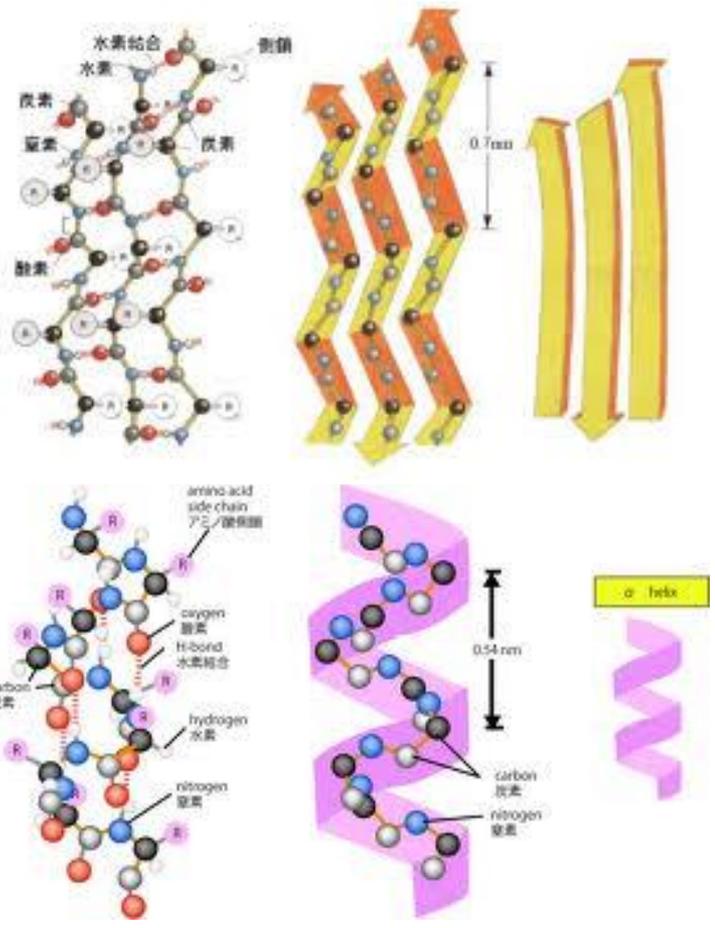


人体の構成成分  
水分: 60~70%  
タンパク質: 15~20%  
脂肪: 13~20%  
ミネラル: 5~6%  
糖質: 1%

**約 60 兆個**

?? 個



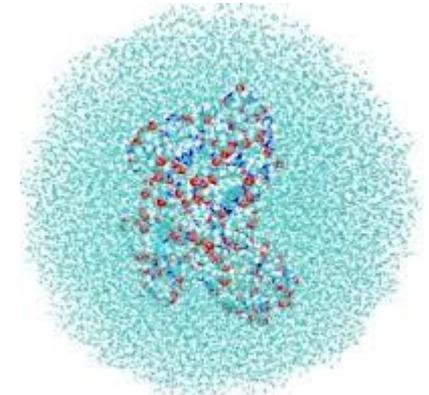
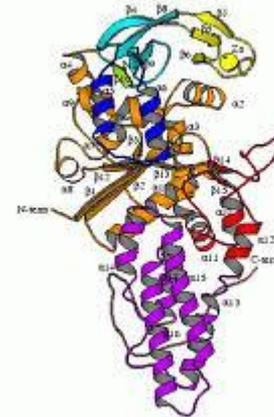
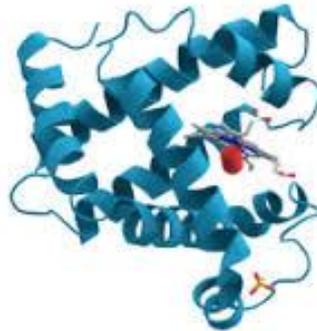
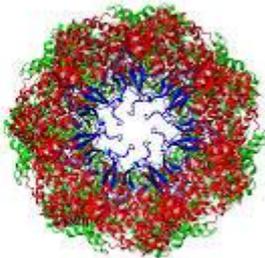
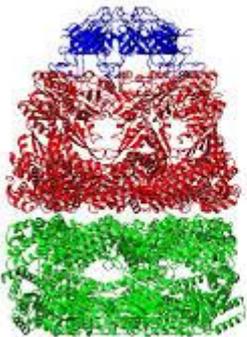
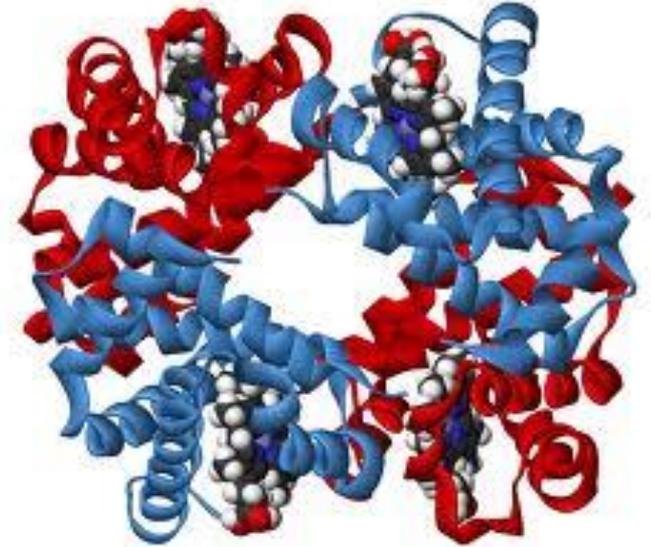
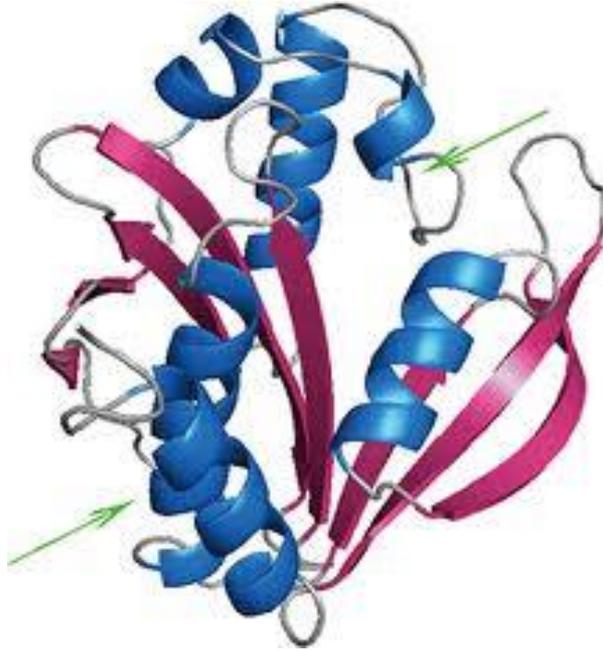


アミノ酸の長い鎖が折り重なって一つの蛋白質を作る





生命の機能 = 蛋白質の構造





蛋白質の構造がどのような振る舞いを起こすか理解する

→生命機能の理解



蛋白質を構成する原子、周りの水分子の様々な相互関係を力学的に解析する為に膨大な計算量が必要。



①スーパーコンピュータをもちいてシミュレーションする。(実験)

②計算量を減らすための新しい理論を構築する。(理論)

ノーベル  
賞





# スーパーコンピューター とコンピューターの違い

## 定義

理論性能値が 1.5TFLOPS 以上のコンピューター  
↓  
(T)=10の12乗 = 兆、(FLOPS)一秒間に何回計算できるかの単位

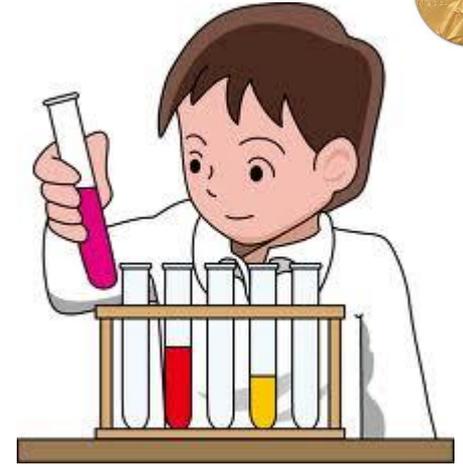
しかし、新型のMac Proの性能が1.5TFLOPSを超える可能性が出てきており、一般消費者(大学などの研究機関レベル)がスーパーコンピュータを手に入れるには、法律的に許されていないため現在この定義が問題になっている。





# スパコン→計算機→シミュレーション とにかく計算量が凄い！





実験科学

理論科学

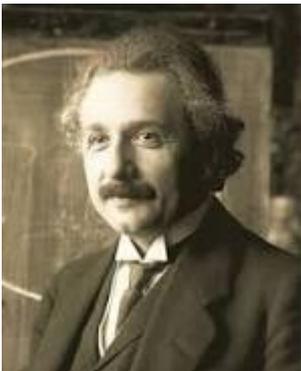
計算科学



Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi$$

The equation that describes how the quantum state of a physical system changes with time.

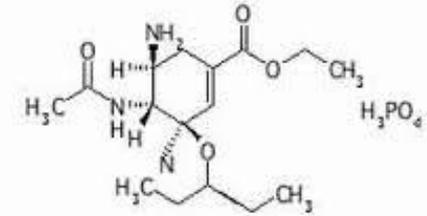




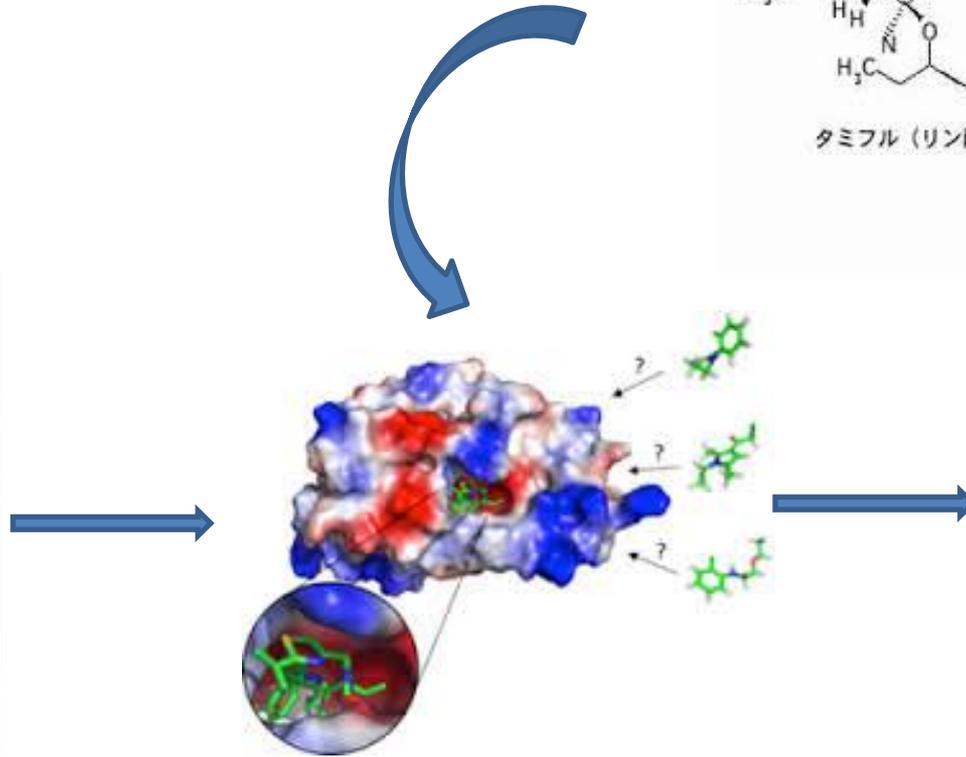
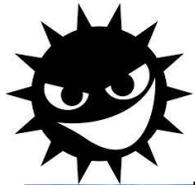
# 計算科学が解決する問題の一つ

↓  
効率性

↓  
創薬開発



タミフル (リン酸オセルタミビル)





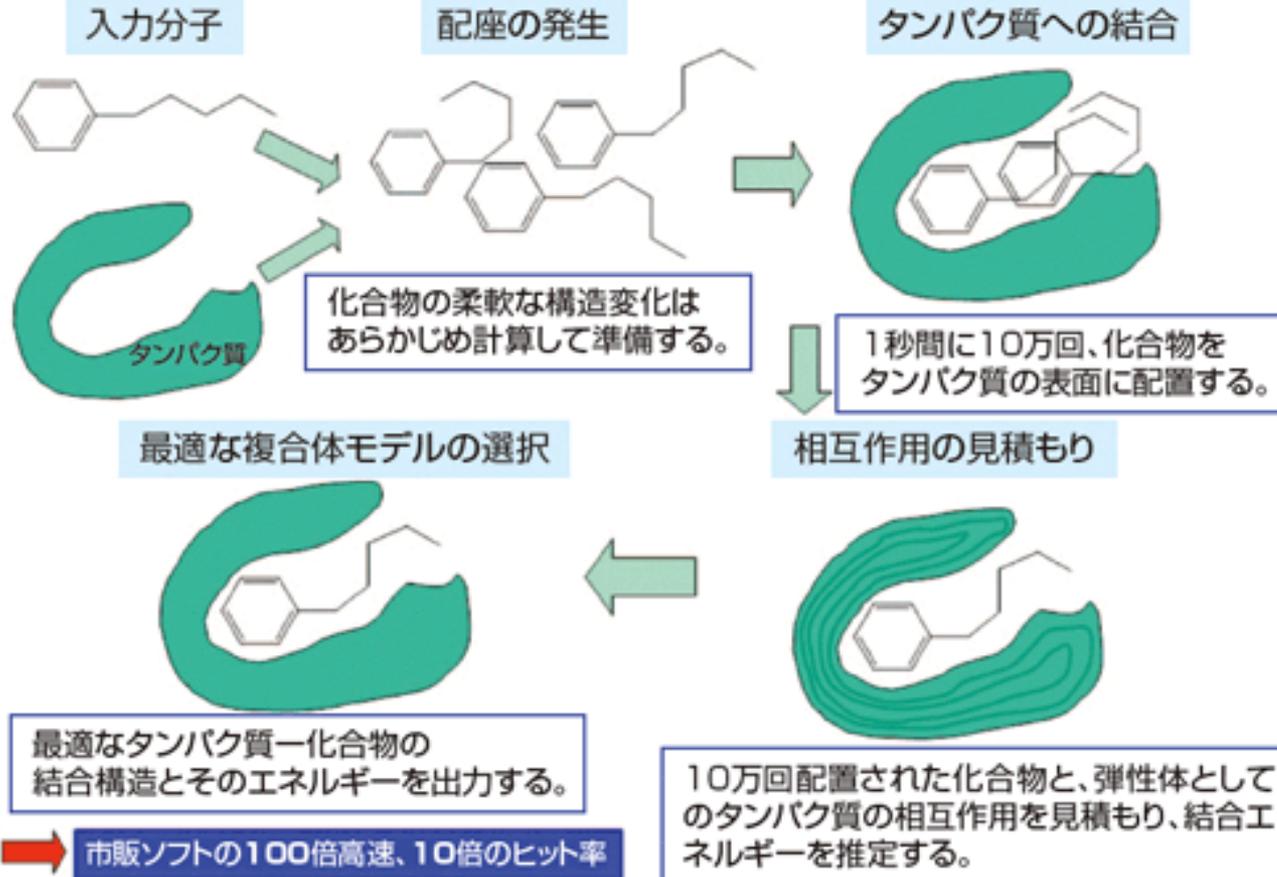
# 計算科学が解決する問題の一つ

↓  
効率性

↓  
創薬開発

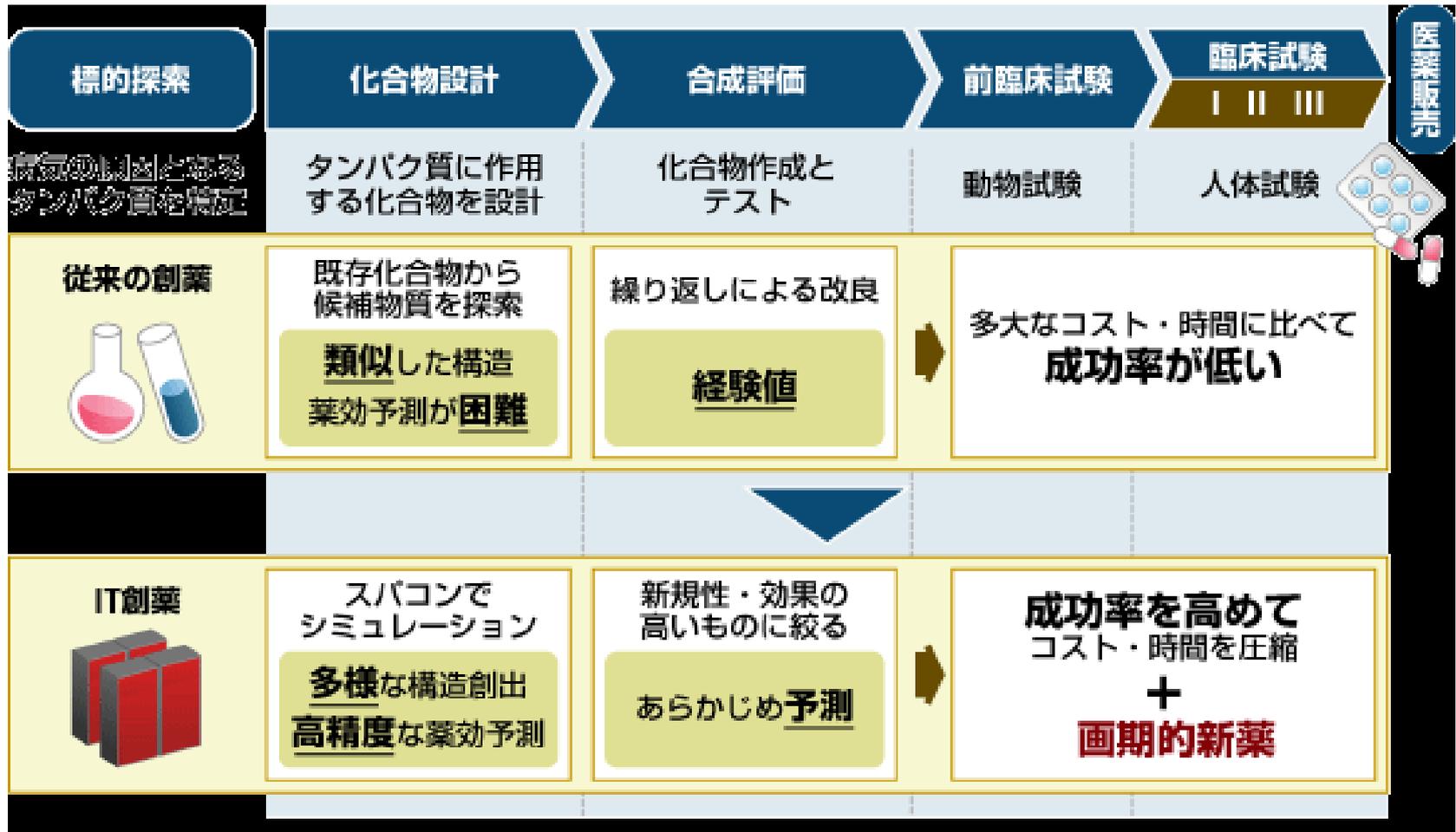


## 化合物ドッキングソフト myPresto/Sievgene の概要





# 製薬企業が抱える問題を 計算科学が解決する！





# IT創薬について

- 現在の製薬業界の抱える問題



開発費用が莫大。

開発にかかる時間も莫大。

化合物を探索→副作用が起きないかの実証→薬を試すための患者の応募

ベンチャー企業が開発した薬

を買収し、既存のルートに流し、利益を確保する。



# Drug Design

- 蛋白質の構造データをパソコンに取り込み、病気の原因となる構造とパソコン内で反応させることによって、ある程度の精度で、予測できるようになる。

→今までは、試験管にとりわけ、一つずつ反応を確認していたが、パソコンと併用することによって、候補となる化合物探索がかなり効率的になる。(平均15年の期間と500億円のコスト)



# 世界最大の蛋白質データベースの 日本拠点が大阪大学にあります。

**PDBj**  
Protein Data Bank Japan  
**Protein Data Bank**  
**Japan**  
日本蛋白質構造データバンク  
<http://www.pdbj.org/>

大阪大学蛋白質研究所にて実施。  
(独立行政法人)科学技術振興機構  
バイオインフォマティクス推進センター  
(<http://www-bird.jst.go.jp/>)が  
2001年から支援

原子種とその座標、アミノ酸残基、実験手法、  
実験時の情報、実験観測データ(構造因子)  
を整理して登録。Webから無料公開。

The screenshot shows the PDBj website with various search filters and a list of recent entries. The list includes:

- 20181113: PDBj が開発しておりますフリーの分子グラフィックス・ビューア、[PDBviewer] がリリースされました。displayname: onoff のコマンド機能が追加され、多種な表示が容易にできるようになっております。どうぞ、こちらからダウンロードしてください。
- 20181111: 2018年10月(月) 18日(火) に、「50イサイエンス・アワード」大賞を受賞した、鳥居 五郎先生が大阪大学名誉文化功労者に選ばれました。[PDBj] へもご挨拶申し上げます。
- 20181030: PDBj 最新版検索機能ファイルバージョンが公開されました。[PDBj]
- 20181019: PDBj 最新版のリリースが完了しました。





**ご静聴ありがとうございました。**