

課題名 (タイトル) :

長距離補正密度汎関数法を用いた経路積分分子動力学シミュレーション

利用者氏名 : 〇川島 雪生

理研での所属研究室名 :

計算科学研究機構 フラッグシップ 2020 プロジェクト アプリケーション開発チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、たんぱく質や酵素の中に通常の水素結合よりも結合が強く、結合距離が短い、いわゆる低障壁水素結合が注目を集めている。この低障壁水素結合がたんぱく質や酵素の機能発現などに重要な影響を与えていることを示唆する実験結果が得られている。しかし、実験では水素結合の詳細な解析は難しく、理論計算による検証が望まれている。

その一方で、イオン-水の水素結合を持つような分子系において、通常の水素結合よりも強く短い水素結合の存在が明らかになっているが、その水素結合の精密な解析には、水素原子核の量子揺らぎの考慮が必要不可欠である。従って、上記の低障壁水素結合の精密な解析においても水素結合の量子揺らぎを考慮する必要性が容易に予想できる。

原子核の量子揺らぎを記述できる手法として経路積分分子動力学シミュレーションは大変強力な武器である。ab initio PIMD 法は、温度効果に加え、on-the-fly で電子状態を量子力学的に、さらには核自身の量子性も含んだ、全自由度の量子力学的取扱いを可能とする手法である。On-the-fly PIMD 法では、核の量子性を古典粒子の集まり(ビーズ)として表現する。その結果、室温であっても水素の量子揺らぎが無視できず、重水素置換による劇的な構造変化を理論的に見出すことに成功している。

On-the-fly PIMD 法では、ビーズの数の電子状態計算を同時に行い、シミュレーションを実行する必要があるが、電子状態計算のコストがボトルネックとなる。そこで、電子状態を効率よく計算できる長距離補正密度汎関数法を用いた経路積分分子動力学シミュレーションを行うことで、電子状態と原子核の量子揺らぎの双方を精度よく計算することを試みる。また、複数の電子状態計算を同時に計算しつつ分子動力学シミュレーションを行うため、計算量は非常に多くなり、スー

パーコンピュータは大変有用となる。

本研究では、高精度電子状態計算に基づく原子核の量子揺らぎを考慮した分子シミュレーションを用いて、生体分子の低障壁水素結合の精密な解析を行う。核の量子揺らぎがたんぱく質の三次元構造や機能発現にどのような影響を与えるかについて明らかにすることを目的とする。核の量子揺らぎを考慮することによって低障壁水素結合形成メカニズムを明らかにできれば学術的にインパクトは高い。

2. 利用がなかった場合の理由

今年度は、長距離補正密度汎関数法を用いた生体分子の電子状態計算を実行するための新しい QM/MM 法を開発し、プログラムの実装を行った。現在、テスト計算を実施している。今年度中には、スーパーコンピュータでシミュレーションの実行を行う予定である。シミュレーションを実行するための準備も整っている。2月末から3月にかけてシミュレーションを実行し、成果を出す所存である。