

プロジェクト名(タイトル):

生命分子の実験的制限付き構造決定

利用者氏名:山崎俊夫(1)

理研における所属研究室名:

(1) 生命機能科学研究センター 構造 NMR 技術研究ユニット

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

核磁気共鳴(NMR)から得られる生体分子の各原子まわりの情報は生体分子の構造やそのダイナミクスと機能の関係を解明するうえで有用である。特に、結晶化できない柔らかい状態、動きのある状態での解析には NMR は不可欠である。もっとも基本的な各原子の情報は化学シフト(chemical shift)と呼ばれる、共鳴信号の周波数の主磁場に対する比である。構造依存性があるので、仮定した構造の妥当性を調べることに使われる。

NMR に使われる HTS(高温超電導体)磁石の磁場解析を補助的に行った。Tape 状導体が遮蔽電流を面内に流すので、磁場が歪む。quench などの磁場変動時に発熱の原因になり、quench 伝播の計算にも必要である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

quantum espresso の package を使って、構造から電子分布を求める。Density functional theory と plane wave による展開を使うことによって、比較的大きな分子での計算が可能になっている。gipaw (gauge including projector augmented waves)法により NMR 化学シフトを計算した。

Vdw 力や運動性を含めた計算を整備した。

磁場解析 program は自力開発である。電流と磁場の方程式に基づいて、時間変化を求めることができた。Openmp を使うことで、高速化できた。

3. 結果

運動性を含めるには、molecular dynamics 計算をする。時間経過に沿って、構造を取り出し、それぞれの NMR shielding を計算した。ばらつきが落ち着くためには 100 構造以上必要であることが分かった。計算時間は energy 最低構造を求める場合の 100 倍以上必要と思われる。1H, 13C

の化学シフトの分布は 5%程度小さくなる。労力の割には小さな差であるが、energy 最低構造の化学シフトはいつも観測値より分布が 10%も広いことが多かったので、正しい方向の補正になっている。

磁場解析は磁石開発に必要な parameter を得ようとしている。臨界電流密度の磁場温度依存性を組み合わせて、実際の磁石での simulation ができるようになった。ただし、実測とあう場合、合わない場合があり、情報の整理が必要である。

4. まとめ

Molecular dynamics と quantum chemistry を使った有限温度の NMR shielding の計算は測定値との一致度が改善される。

磁石コイルの磁場解析は磁石設計に使えるようになった。

5. 今後の計画・展望

Super cellを使った molecular dynamics は必要なのか、VdW は何を選択したらいいのか、より良い simulation 法を開発したい。

quench 時の磁場変化から発熱を simulation に組み込み、quench analysis と screening effect を融合させたい。