

3E03

FMO-MD 法の再実装と溶液計算への応用

(産総研¹、立教大²、衛研³) 古明地勇人¹、石川岳志²、望月祐志²、山高博²、中野達也³

【序】FMO-MD 法は、名前の通り、フラグメント分子軌道法(FMO 法[1])を用いた分子動力学法(MD 法)である。我々は以前、FMO-MD 法を、FMO 用ソフト ABINIT-MP と MD 用ソフト PEACH を融合して実装した[2,3]。その後、FMO 法が大幅に進歩したため、今回、両ソフトの最新版を再融合して、FMO-MD 法を再実装したので、その詳細を発表する。さらに、純水を対象にしたベンチマーク計算を紹介する。

【FMO-MD 法の実装】今回は、ABINIT-MP 2006 と PEACH ver. 7 を、システムコールを利用して融合することで、FMO-MD 法を実装した。以前の実装では[3]、ABINIT-MP をサブルーチンライブラリー化して PEACH から呼んで利用していた。この方法は、ABINIT-MP を改造するたびに、インターフェースを書き直す必要があり、開発者の負担になっていた。今回の再実装では、ABINIT-MP は独立のプログラムとして実行しており、両プログラム間のデータは中間ファイルを用いて行う。この方法なら、中間ファイルの形式さえ同じにしておけば、ABINIT-MP を改造しても、インターフェースを書き換える必要はない。

【純水の FMO-MD】現在、我々は、水和した低分子化合物を対象に FMO-MD 計算を行っている[4]。そのような計算の基礎データになるように、純水の計算を行ったので、紹介する。具体的には、図 2A の水球(125 分子)に対して、表 1 の四種類の FMO-MD (およびエネルギー極小化,FMO-EM) 計算を行い、ポテンシャルエネルギーの変化を比較した。表 1 でわかるように、初期構造として、古典 MD (TIP3P ポテンシャル) でアニーリングした構造を用いることの効果と、昇温過程 (0.5 ps) 間に RATTLE(TIP3P 構造に拘束)を使って計算時間を短縮することの是非、の二つを調べたわけである。

表 1 FMO-MD の条件

	初期構造へのアニーリングの有無	昇温での RATTLE の有無 (時間刻み、fs)
Sim1	無	無 (0.5 fs)
Sim2	無	有 (1 fs)
Sim3	有	無 (0.5 fs)
Sim4	有	有 (1 fs)

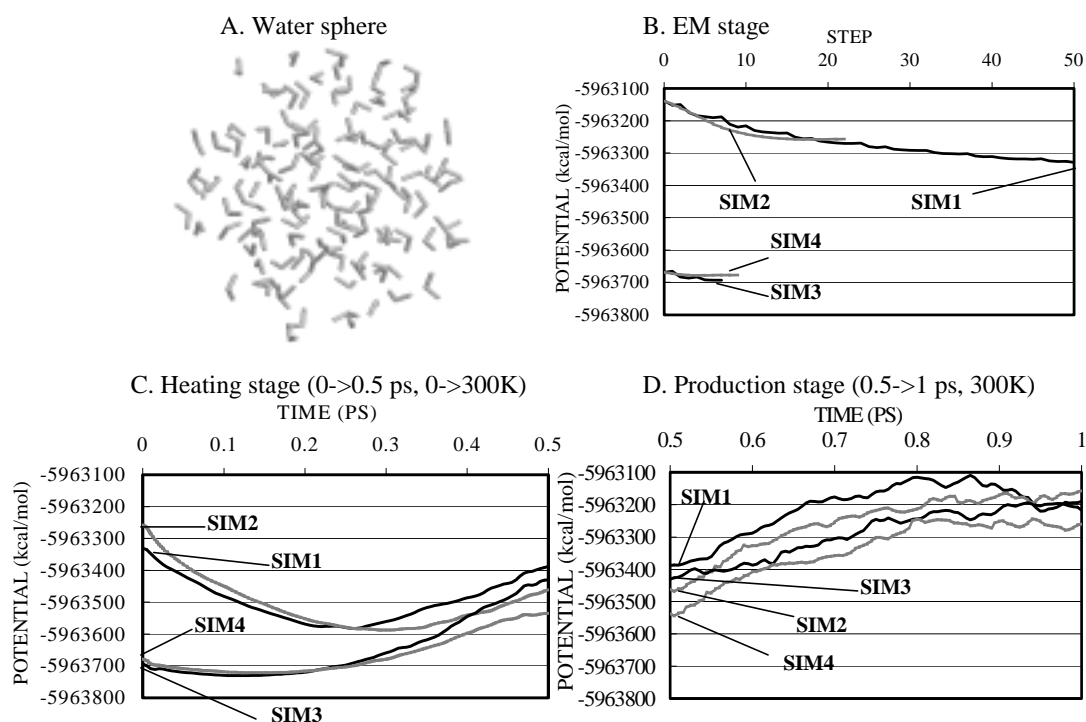
全ての計算は、HF/6-31G*で行った。

図 1B,C,D にポテンシャルの変化を示す。古典 MD でアニーリングした初期構造を用いた場合は、そうでない場合に較べて、極小化でエネルギーが落ちるのが早く、また、昇温では、温度を上げるに連れてポテンシャルが上がっていくのが分かる。一方、昇温に RATTLE を入れた場合とそうでない場合では、特に違いは見られなかった。なお、最終的な本計算 (図 1C) は、今回は 4 つとも安定に動いた。

これらの結果より、次のことが示唆される。まず、古典 MD でアニーリングした構造を用いる

と、FMO-EM の計算時間が短縮でき、続く昇温過程では、より安定に FMO-MD を走らすことができる。ただし、古典MDでのアニーリングが絶対必要というわけではない。だが、今回はなかったものの、アニーリングしていない初期構造を用いると早い段階で MD が破綻することがあるから、注意すべきである。また、必要に応じて RATTLE を使えば、計算時間が短縮できる。

図 1 水の FMO-EM/MD におけるポテンシャルエネルギーの変化



以上、FMO-MD の実装とベンチマークを示した。FMO-MD の実用計算については、「**1E21** FMO-MD 法によるジアゾニウムカチオンの加水分解反応シミュレーション」「**4P072** FMO-MD/MLFMO-CIS(D)法による水和分子の励起状態シミュレーション」を参照していただきたい。

本研究は、JST-CREST プロジェクト「フラグメント分子軌道法による生体分子計算システムの開発」の一環として行われた。

【文献】

- [1] Kitaura, K. Ikee, E., Asada, T., Nakano, T., Uebayasi, M., Chem. Phys. Lett. 313 (1999) 701-706.
- [2] Komeiji, Y., Nakano, T., Fukuzawa, K., Ueno, Y., Inadomi, Y., Nemoto, T., Uebayasi, M., Fedorov, D. G., Kitaura, K. (2003) Chem. Phys. Lett. 372, 342-347.
- [3] Komeiji, Y., Inadomi, Y., Nakano, T. (2004) Comput. Biol. Chem., 28, 155-161.
- [4] Mochizuki, Y., Komeiji, Y., Ishikawa, T., Nakano, T., Yamataka, H. (2007) Chem. Phys. Lett. 437, 66-72.