FMO-MD法:

タンパク質・核酸に適用可能な量子分子動力学法

(産総研、衛研*)〇古明地勇人、中野達也*、ドミトリー・フェドロフ、稲富雄一、北浦和夫

【要旨】*ab initio* FMO-MD 法(*ab initio* Fragment Molecular Orbital method based Molecular Dynamics) という量子化学に基づいた分子動力学法を開発した。この方法では、フラグメント分子軌道法((*ab initio*) Fragment Molecular Orbital method, FMO) で電子状態を決めながら、分子動力学シミュレーション(Molecular Dynamics, MD)を行う。生体分子のような巨大分子にも適用可能である。FMO-MD 法を、ソフトウェア PEACH4.8 with ABINIT-MP20021029 に実装した。このソフトを用いてグリシン十量体のシミュレーション計算を行ったところ、充分な精度のトラジェクトリーが得られた。

【序】

FMO 法は、最近開発された、非経験的分子軌道法の高速近似法である[1-4]。分子系をいくつ かのフラグメントに分割して、それぞれのフラグメントおよびフラグメント対について分子軌道 計算を行い、巨大分子系の電子状態やエネルギーを、計算する。それぞれのフラグメントとフラ グメント対の計算をする際に、周囲からの影響を取り込むことで、近似の精度を上げている。 計 算速度は、フラグメント数を Nとすると O(N²)である。また、並列化計算に適している。

今回、FMO 法を分子動力学シミュレーション(MD)に応用して、FMO-MD 法を開発したので[5]、 報告する。

【方法】

FMO-MD 法では、ある分子系の時間発展を、原子核に掛かる力(エネルギー勾配[3])をFMO 法で計算し、その力を用いて、それぞれの原子核を MD 法で動かすことで、電子状態を考慮しな がらシミュレーションすることができる。FMO-MD 法は、FMO 用ソフト ABINIT-MP [2,4]と、 生体分子 MD 用ソフト PEACH [6,7]を組み合わせることで実装した。

出来上がったソフト(PEACH4.8 with ABINIT-MP20021029)を用いて、グリシン十量体の FMO-MD 計算を行った。定エネルギーMD、定温 MD などを試験した。結果は、通常の ab initio MO 計算による MD 法(MO-MD)と比較検討した。

【結果と考察】

図 1 に FMO-MD 法によられた構造の重ね合わせを、また、表 1 に様々なアルゴリズムでの MO-MD と FMO-MD でのエネルギーの平均と揺らぎを示す [5]。表 1 で、「保存量」には下線を 引いてあるが、これら保存量のゆらぎは、MO-MD と FMO-MD で、ほぼ同じ程度の値である。 この結果から、FMO-MD によって、MO-MD に比較して遜色のない精度のトラジェクトリーが 得られたことがわかる。

現在、FMO-MD 法を、より大きな分子系への適用を検討するための、ソフト整備やテスト計 算を行っている。詳細は、会場で発表する。 Figure 1. Superimposed structures of FMO-MD of (Gly)₁₀ peptide.



Ensemble		Kinetic	Potential	Total	Nose Hamiltonian
(1)	NVE				
	MO-MD	65.8	-1.327980 x 10 ⁶	<u>-1.327914 x 106</u>	
		(3.47	3.49	<u>0.0242</u>)	
	FMO-MD	66.4	-1.327981 x 10 ⁶	1.327914 x 10 ⁶	
		(4.03	4.04	<u>0.0359</u>)	
(2)	NVT (Zhang)				
	MO-MD	<u>64.9</u>	-1.327978 x 10 ⁶	-1.327913 x 10 ⁶	
		(<u>1.67 x 10⁻¹³</u>	4.61	4.61)	
	FMO-MD	<u>64.9</u>	-1.327979 x 10 ⁶	-1.327914 x 10 ⁶	
		(<u>1.97 x 10⁻¹³</u>	5.17	5.17)	
(3)	NVT (Nose)				
	MO-MD	65.1	-1.327980 x 10 ⁶	-1.327915 x 10 ⁶	<u>-1.327914 x 10⁶</u>
		(6.50	4.20	7.78	<u>0.0276</u>)
	FMO-MD	65.1	-1.327980 x 10 ⁶	-1.327915 x 10 ⁶	<u>-1.327914 x 10⁶</u>
		(8.29	4.97	10.3	<u>0.0462</u>)

Table 1. Averages and rms fluctuations (within parentheses) of energies in conventional MO-MD and FMO-MD

Conservative quantities are underlined.

文献

[1] K. Kitaura, E. Ikeo, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 313 (1999) 701.

[2] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, Y. Akiyama, M. Uebayasi, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 318 (2000) 614.

[3] K. Kitaura, S. Sugiki, T. Nakano, Y. Komeiji, M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 336 (2001) 163.

[4] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 351 (2002) 475.

[5] Y. Komeiji, T. Nakano, K. Fukuzawa, Y. Ueno, T. Nemoto, M. Uebayasi, D. G. Fedorov, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 372 (2003) 372.

[6] Y. Komeiji, M. Uebayasi, R. Takata, A. Shimizu, K. Itsukashi, M. Taiji, J. Comp. Chem. 18 (1997) 1546.

[7] Y. Komeiji, M. Haraguchi, U. Nagashima, Parallel Computing 27 (2001) 977.