

## 1Dp08

### 蛋白・核酸理論研究のための非経験的量子化学計算ツールの開発

(豊橋技科<sup>a</sup> 科技団<sup>b</sup>)

○ 関野 秀男<sup>a</sup> ・ 杉木真一郎<sup>a,b</sup> ・ 仙石康雄<sup>a</sup> ・ 井上英計<sup>a</sup> ・ 澤田寛明<sup>a</sup> ・ 栗田 典之<sup>a</sup>

巨大生体高分子などナノスケールの非経験的量子計算では全系の完全に変分的記述は現段階ではかなり困難であり、また生体活性の理論解明という観点からはあまりに些細な **artifact** 解決にほとんどの計算労力を費やす結果になりかねない。我々のグループではこうしたシステムの理論解明と技術的制約とのトレードオフをはじめから念頭に入れ、プログラム開発を進めている。蛋白や核酸などの生体高分子はその構造の柔軟性と、いたるところに存在する電気的分極により生体機能の発現を誘発する。分極をとおした構成フラグメント間の相互作用は弱いが多く箇所ですべて同時に働き有機的に作用する。こうした相互作用を量子論的に表現するには多体効果である電子相関が重要となってくる。然し伝統的な量子化学の方法論による電子相関効果の見積りは多大な計算労力を要し、現在のところこうした巨大系への応用をめざしたプログラムの基礎アルゴリズムとして採用するには多くの乗り越えるべき困難を抱えている。我々は密度汎関数法(DFT)をフラグメント分子軌道法(FMO)の枠組みに採り入れることによりプログラム開発をおこなっている。多くの化学結合の理論解明に有力である汎関数が分子間力の記述に無力であることから、汎関数の選択や改良も同時に行っている。DFT FMO 法は Hartree Fock (HF) FMO 法のほぼ延長上にあるが HF FMO 法では起こらなかった、フラグメント電荷の収束困難という新たな問題に遭遇した。 現在そうした問題を解決し、並列化により現

実系への応用が可能なプログラムが完成しつつある [4]。FMO 法による全エネルギーが近似なしの計算に比べかなり定量的に満足が行くものである事は本方法の提唱者である北浦[1,2]や他の日本人研究者等[3]により示されてきたが、我々は主に生体分子の活性やナノスケール分子の物性算定に関する定性的理論枠組みとしてどれほど有用であるかと言う観点で我々の理論とそれに基づいて構築されたプログラムの数値的検証を行ったので報告する。

FMO の全エネルギー算出に用いる密度行列を用い一次の物性を算定

$$P = \sum_{I>J} P_{IJ} - (N-2) \sum_I P_I$$
$$P_I = \text{Tr}\langle P_I \rho_I \rangle \quad P_{IJ} = \text{Tr}\langle P_{IJ} \rho_{IJ} \rangle$$

すると近似なしの算定値をかなり良く再現することから、ゼロ次の FMO とそのペア補正がかなり良い近似であることがわかるが[5]、更に高次の物性もかなり良く再現できることが分かった。計算の些細や FMO が良い近似とならない応用例などについては当日発表する。

[1] K.Kitaura, T.Sawai, T.Asada,T.Nakano,M.Uebayashi, Chem. Phys. Lett. 312, (1999) 319.

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

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

[4] S. Sugiki, Y. Sengoku, N. Kurita and H. Sekino, submitted.

[5] H. Sekino, Y. Sengoku, S. Sugiki and N. Kurita, to appear in Chem. Phys. Lett..

本研究は、JST-ACT (研究開発課題「DNA のナノ領域ダイナミクスの第一原理的解析」) の援助を受けて行われた。