

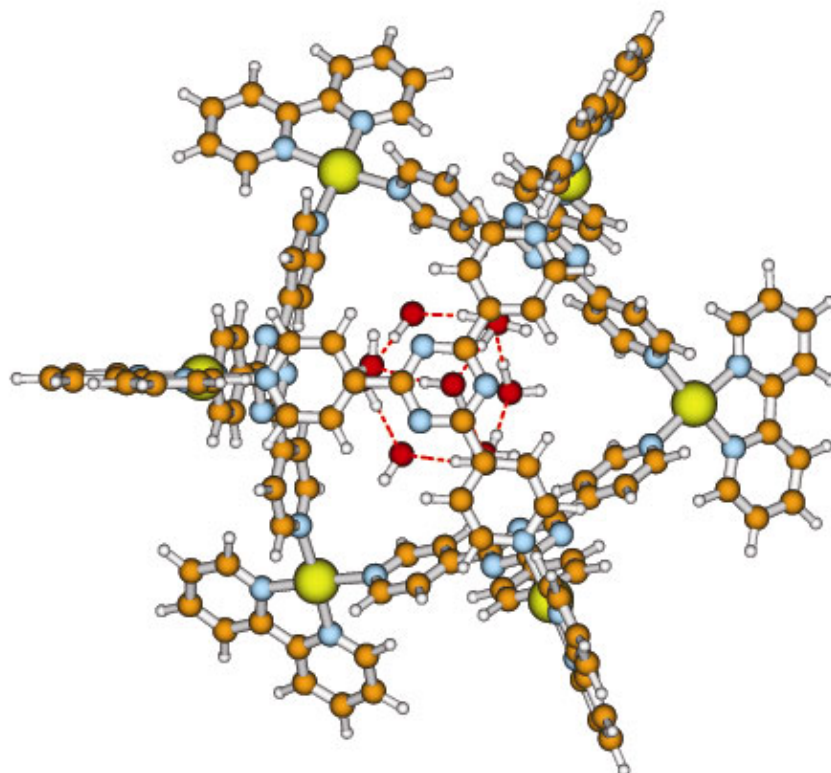
QM/MM レプリカ交換を用いた最安定構造の探索

(¹分子研・²JST/CREST・³総研大) ○^{1,2}川島雪生・^{1,2,3}岡本祐幸

【序】大きな分子クラスターには、局所安定構造が非常に多く存在し、通常の geometry optimization algorithm では最安定構造を求めることが困難である。それに対して、レプリカ交換法¹⁻⁴はポリペプチドやクラスターのような局所安定構造が多数存在する系の最安定構造を求めるのに非常に有用であることが示されている。

本研究では、このレプリカ交換法を分子内包クラスターに適用する。近年、有機合成などの分野において分子内包クラスターの研究は非常に盛んであり、X 線回折による構造解析が行われているが、水素原子については調べることが出来ない。そのため、内包されるもの（ゲスト）が水クラスターなどの場合、酸素分子の位置しかわからず、まわりのクラスター（ホスト）との相互作用などの議論が出来ない。

そこで、本研究は、クラスターの最安定構造の探索し、ホストとゲストの相互作用について調べることを目的とし、レプリカ交換法を水クラスターが内包される分子内包クラスターに適用する。



【計算手法】系が大きいので、すべての分子を *ab-initio* 分子軌道計算で扱うのは難しい。そこで、ゲストの水分子を Quantum Mechanics、ホストを Molecular Mechanics で扱う QM/MM 法を用いる。ホストとゲストは 3 Å 以上はなれており、ホストを MM で扱っても差し支えない。ホストはゲストと比較し、非常に重いのでゲストの配置のみをモンテカルロ法にてサンプリングする。徐冷法とレプリカ交換法を用いてシミュレーションを行う。本研究の計算には、UTChem⁵ を用いており、量子化学計算では INTEGRA⁶ module、シミュレーションでは、S&D⁷ module をそれぞれ用いている。

【結果】当日は古典力学を用いた結果と QM/MM 法を用いた結果とを比較する。また、徐冷法による結果とレプリカ交換法による結果についても議論する。

- [1] Hukushima K. and Nemoto K.: J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996), 1604
- [2] Geyer C.J.: Keramidas E.M. (Ed.), Computing Science and Statistics: Proceedings of the 23rd Symposium on the Interface, Interface Foundation, Fairfax Station (1991) 156
- [3] Swendsen R.H. and Wang J.-S.: Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 2607
- [4] Ishikawa Y., Sugita Y., Nishikawa T., Okamoto Y.: Chem. Phys. Lett. 333 (2001) 199.
- [5] UTChem: Yanai, T.; Kamiya, M.; Kawashima, Y.; Nakajima, T.; Nakano, H.; Nakao, Y.; Sekino, H.; Paulovic, J.; Tsuneda, T.; Yanagisawa, S.; Hirao, K.
- [6] INTEGRA: Emoto, M.; Iikura, H.; Inoue, H.; Kamiya, M.; Kawashima, Y.; Nakajima, T.; Nakayama, K.; Sekino, H.; Sorakubo, K.; Tawada, T.; Tsuneda, T.; Yagi, K.; Yanagisawa, S.; Yanai, T.
- [7] S&D: Kawashima Y.