

## 1P161

## ABINIT-MP プログラムの最近の機能拡張

(アドバンスソフト<sup>1</sup>・JST-CREST<sup>2</sup>・東大生産研<sup>3</sup>・国立衛生研<sup>4</sup>・立教大<sup>5</sup>・みずほ情報総研<sup>6</sup>・産総研<sup>7</sup>・神戸大<sup>8</sup>) 望月祐志<sup>1,2,3</sup>, 中野達也<sup>2,4</sup>, 石川岳志<sup>2,5</sup>, 福澤薫<sup>2,6</sup>, 加藤昭史<sup>2,6</sup>, 田中皓<sup>1,2,3</sup>, 常盤広明<sup>2,5</sup>, 甘利真司<sup>3</sup>, 北浦和夫<sup>2,7</sup>, 田中成典<sup>2,8</sup>

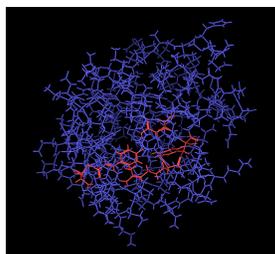
### 【はじめに】

これまで私達のグループでは、フラグメント分子軌道(FMO)法[1]に従い、基底関数積分を直接利用するアルゴリズムと並列処理の組み合わせによって、タンパク質や核酸等の巨大生体分子を実用時間で計算可能とする ABINIT-MP コード[2]を開発してきている。昨年のポスターでは、MP2 の実装[3]とベンチマーク計算[4]について主に報告したが、この1年で幾つかの実応用計算が行われ、タンパク質における van der Waals 相互作用の重要性が示された：女性ホルモン受容体(ER)については 1P160 をご参考。この要旨では、新たに開発した多層(ML)FMO[5]による CIS[6]、フラグメント間の軌道相互作用解析(CAFI)[7]の実装とテスト計算について報告するが、当日は CPHF に基づく動的分極率[8]と2次収束性 SCF、さらに CASSCF についても発表する予定である：CASCI については 1D11 をご参考。

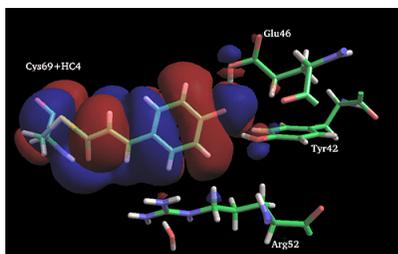
### 【MLFMO-CIS】

視物質等の光応答タンパク質には、吸収・発光を担う色素分子と静電的相互作用あるいは水素結合によって“環境”を与えている小数のアミノ酸残基から構成されるクロモフォアと呼ばれる中心領域が存在する。私達は、系全体を FMO-HF で解いたあと、クロモフォア領域に対してのみ CIS を適用する MLFMO-CIS 法を ABINIT-MP に実装した[6]。CIS のエンジンは、基底関数積分からの Fock 様行列の構築を経てシグマベクトルを計算するようになっており、コストは  $N^4$  オーダーで済む：もちろん並列化されている。また、CIS では取り込まれない励起状態の軌道緩和エネルギーと基底状態との MP2 差分相関エネルギーを size-extensive に補正する CIS(D)[9]を CSF ベースで定式化したエンジンを現在コーディング中である。

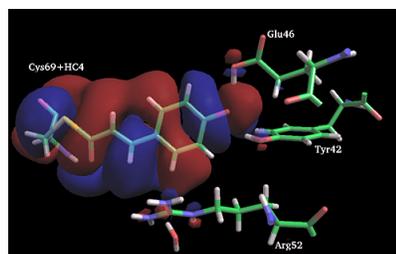
下図左は、残基数 125 の好塩細菌の光活性黄色タンパク質(PYP)の模式図である。6-31G 基底を用い、クロモフォアとして色素中心のクマル酸とチオエステル結合した Cys69、及び水素結合に重要な Glu46、Tyr42、Arg52 を取って計算したところ、第一励起状態のエネルギーとして 4.28eV が得られた。実験値は 2.78eV で一致はよくないが、CIS(D)の導入によって改善されると思われる。下図中と右は各々、空孔軌道と粒子軌道の可視化で、励起による節の数と位置の変化が興味深い。なお、PYP の MLFMO-CIS の全計算時間は Xeon(3.06GHz)64 台で 11.2 時間、CIS のカーネル時間のみなら僅か 24.4 分であり、実用性を実証している。



< 赤がクロモフォア >



< 空孔自然軌道：占有数 1.06 >

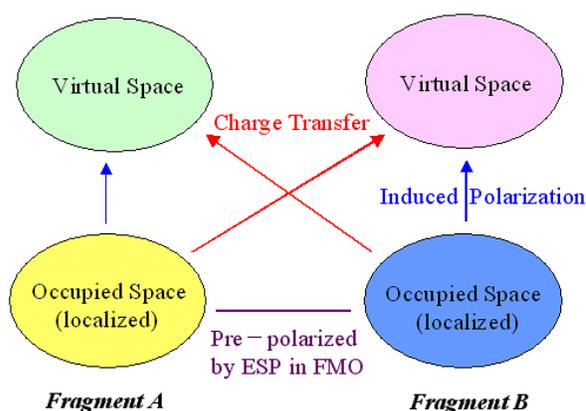


< 粒子自然軌道：占有数 0.94 >

## 【CAFI】

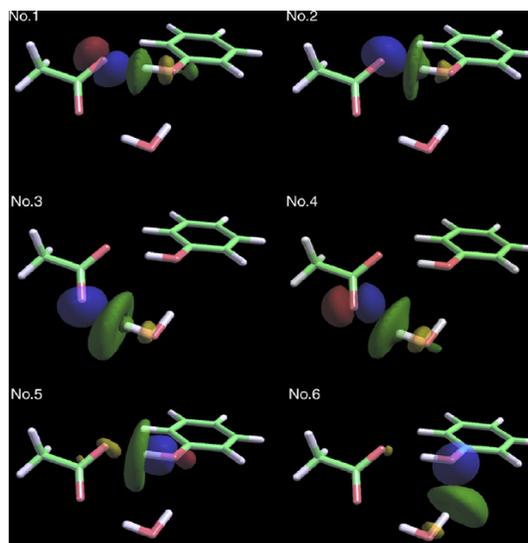
CAFI[7]は、生体系あるいは溶液系で重要な水素結合に伴う電荷移動(CT)に注目して、フラグメント間の水素結合のトポロジーを定量的・可視的に解析することを目指して開発した：下図左が概念図になる。CAFI計算のカーネルは、size-extensiveな軌道緩和法であるCERF[10]であり、CIS[6]と同様に基底関数積分からのFock行列の構築により効率良く処理出来る。

下図右は、重要な水素結合のみを取り出したERのモデルで、リガンドをフェノール、CT寄与の大きいGlu353を酢酸イオンとし、さらにゲストの水を加えたものである：より大きいモデルでの解析は1P160をご参考。計算は、6-31G\*\*で行い、CT元の軌道を赤/青で、CT先の軌道を黄/緑で表示している。Glu353 リガンドのCTに当たる一番目と二番目のエネルギー的寄与は計-18.6kcal/molにもなっている。三番目と四番目はGlu353 水へのCTに、また六番目はリガンド 水へのCTに対応する。五番目は、CTに誘起されたリガンド内での分極を表わしている。



<上：フラグメント間のCTと誘起分極>

<右：ERモデルでの可視化事例>



## 【謝辞】

本研究は、文部科学省 IT プログラム『戦略的基盤ソフトウェアの開発(FSIS)』プロジェクト (<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>)・『戦略的革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発(RSS21)』プロジェクト、ならびにJST-CREST『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』プロジェクトの支援によって行われている。

## 【参考文献】

- [1] Kitaura et al., Chem. Phys. Lett. 313 (1999) 701. [2] Nakano et al., Chem. Phys. Lett. 351 (2002) 475. [3] Mochizuki et al., Theor. Chem. Acc. 112 (2004) 442. [4] Mochizuki et al., Chem. Phys. Lett. 396 (2004) 473. [5] Fedorov et al., J. Chem. Phys. 122 (2005) 054108. [6] Mochizuki et al., Chem. Phys. Lett. 406 (2005) 283. [7] Mochizuki et al., Chem. Phys. Lett. 410 (2005) 247. [8] Mochizuki et al., manuscript in preparation. [9] Head-Gordon et al., Chem. Phys. Lett. 219 (1994) 21. [10] Mochizuki, Chem. Phys. Lett. 410 (2005) 165.