

【結果と考察】

Model I 塩橋 : (a)と(b)の SCF 計算において、ほぼ同一の収束値が得られた。図 3 に最終 STEP におけるマリケン電荷の初期値と収束値の差を示した。マリケン電荷の差が小さいほど、良い初期値が得られたことを意味する。(a)と(b)におけるマリケン電荷の差の分散(σ^2)は、それぞれ 7.703×10^{-4} 、 1.431×10^{-4} であった。従って、(b)の方が良い初期値が得られたことがわかった。(a)では、塩橋を形成する ARG 3 と ASP 5 の部分(斜線部)に大きな差が見られた。これは、塩橋による相互作用を無視した状態で計算を行っているため、良い精度の初期値が出来なかったと考えられる。一方で、(b)ではその差は改善している。これは、(b)は十分に塩橋の効果を取り入れることが出来たことを示している。

Model II 二次構造 : 図 4 に最終 STEP におけるマリケン電荷の初期値と収束値の差を示した。(a)と(b)の分散(σ^2)はそれぞれ、 7.497×10^{-5} 、 1.111×10^{-5} であり、(b)の方が良い初期値が得られた。(a)で見られる電荷の差が比較的大きい原子の多くは、 α -ヘリックス(斜線部)を構成する水素結合に関与する原子であった。一方、(b)ではそれらの差は大きく改善されている。これは、水素結合による相互作用を取り込めたため、精度の高い初期値が出来たと考えられる。 β -シートを含む計算においても、同様の傾向が見られた。

相互作用を考慮することにより、精度の高い初期値が作成できた。今後、計算化学的手法により、それぞれの相互作用エネルギーなどの解析を行う予定である。

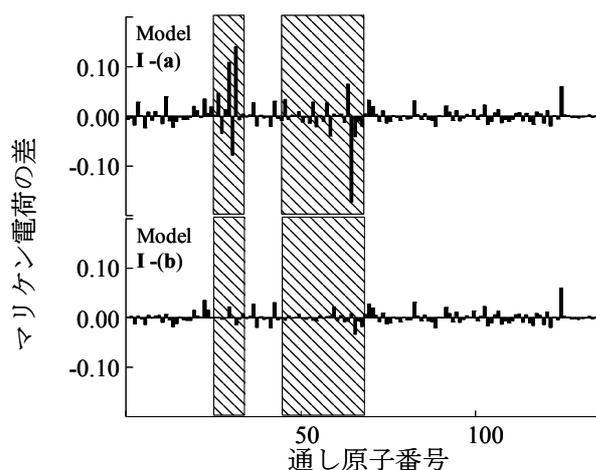


図 3 1FUL の最終ステップにおけるマリケン電荷の初期値と収束値の差

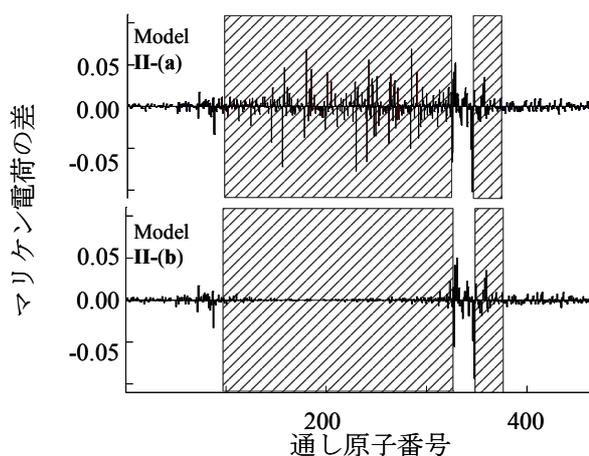


図 4 1BH0 の最終ステップにおけるマリケン電荷の初期値と収束値の差

本研究は文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発プログラム「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」の支援の下に行われた。計算は統計数理研究所の統計科学スーパーコンピュータシステムを利用した(2006-ISM-CRP-1016)。

- [1] Sato, F., Shigemitsu, Y., Yahiro, S., Fukue, M., Kozuru, S., & Kashiwagi, H. (1997) *Int. J. Quant. Chem.* **63**, 245-256
- [2] Kashiwagi, H., Iwai, H., Tokieda, K., Era, M., Sumita, T., Yoshihiro, T., & Sato, F. (2003) *J. Mol. Phys.* **101**, 81-86
- [3] Inaba, T., Tahara, S., Nishikawa, N., Kashiwagi, H., & Sato, F. (2005) *J. Comput. Chem.* **26**, 987-993
- [4] Pace, C.N., Shirley, B.A., McNutt, M., & Gajiwala, K. (1996) *FASEB J.* **10**, 75-83
- [5] Assa-Munt, N., Jia, X., Laakkonen, P., & Ruoslahti, E. (2001) *Biochemistry* **40**, 2373-2378
- [6] Sturm, N.S., Lin, Y., Burley, S.K., Krstenansky, J.L., Ahn, J.M., Azizeh, B.Y., Trivedi, D., & Hruby, V.J. (1998) *J. Med. Chem.* **41**, 2693-2700