

生体分子機能発現機構解析の為の QM/MM分子動力学計算プログラムの開発

○重田 育照、萩原 陽介、J.-Y. Kang、館野 賢
(筑波大学大学院 数理物質科学研究科 物理学専攻)

QM/MM分子動力学法の特徴

古典(MM)力学Level (分子動力学法)

Newton方程式を数値的に解く
系の構造安定性・揺らぎを評価
->Free energy perturbation

+

量子(QM)力学 Level (分子軌道法)

Schrödinger方程式をあらわに解く事で、
系の電子状態を評価
(電子密度分布、化学結合変化、反応経路解析などから、
系の化学物質としての特性に関する知見を得る)

ab initio or 密度汎関数法

Hartree-FockやKohn-Sham方程式を解く
最も良い精度を与えるが、計算時間/メモリコスト大の
為、全電子計算は限定的

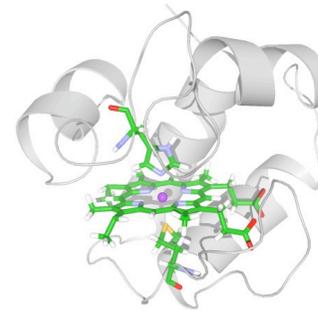
||

QM/MM分子動力学法

Multi-level手法の一種 (量子・古典混合近似)

系の重要な部位の電子状態を評価しつつ、系の構造揺らぎや蛋白質環境の効果を分子力学レベルで評価する

Hemeタンパクによる計算時間の検証



Pseudomonas stutzeri という
バクテリア中に存在
ZoBell Ferrocytochrome c-551
PDB ID: 2I8F (by NMR)

QM region : 79 atoms (Hemeのみ)

MM region : 8502 atoms

UB3LYP/6-31g & amber99

スピン5重項状態

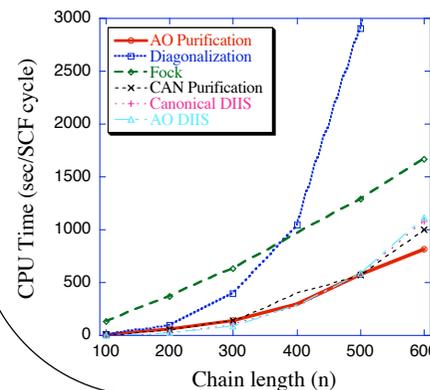
1cpu:343min Altix

8cpu:13min

積分計算の並列性は90%以上だが、UB3LYPのSCF反復回数が多いため、計算に時間を要する

対角化を用いないSCF

Polyene (n=100~600) w.o. QM/MM : 4cpu IBM Power 4



N=600 (3602基底)

66 min/SCF cycle

全体で 13.2時間の短縮

対角化の1/10のコスト