

アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #1

Advanced Application of Fragment Molecular Orbital Method for Apatite Crystal #1

みずほ情報総研(株)¹, 立教大理², 東大生産研³ ○加藤 幸一郎¹, 福澤 薫^{1,2,3}, 望月 祐志^{2,3}

Mizuho Information & Research Institute, Inc.¹, Rikkyo University²,

Institute of Industrial Science, Tokyo University³

○Koichiro Kato¹, Kaori Fukuzawa^{1,2,3}, Yuji Mochizuki^{2,3}

E-mail: kouichiro.kato@mizuho-ir.co.jp, fullmoon@rikkyo.ac.jp

アパタイトはリン酸カルシウム的一种であり、 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{X}$ ($\text{X} = \text{OH}, \text{F}, \text{Cl}$ 等) の組成式で表されるイオン結晶である。このうち X が OH のものはヒドロキシアパタイト (Hydroxyapatite) と呼ばれ、歯や骨の主成分として知られており、近年盛んに研究の行われているナノ・バイオ境界領域における最重要物質の一つである。しかし、従来の第一原理手法を用いた場合には生体高分子と結晶系の相互作用等の解明には大規模な計算が必要となるため、シミュレーションを用いた研究はほとんど行われていない現状にある。一方、1999年に北浦により提唱されたフラグメント分子軌道法 (FMO 法) は計算対象を小規模なフラグメントに分割して計算を行うことで、生体高分子等の非常に大きな系に対する計算を現実的な時間・コストで行う事が可能な手法である。さらに、近年では FMO 法に高次の多体補正を組み込むことで、結晶系に対する適用も進められており、シリカ結晶表面に吸着したペプチドに対する大規模計算事例も報告されている[1]。

そこで我々は、アパタイト結晶に対する FMO 計算の適用を試みた。結果として、クラスタモデル形状・フラグメント分割方法・計算設定を工夫することで、アパタイト結晶に対しても精度よく FMO 計算を実施することが可能であることが分かってきた。本発表では、アパタイト結晶に対する FMO 計算適用の詳細と共に、アパタイト結晶表面へペプチドを吸着させた際の相互作用解析の結果についても報告する。

【謝辞】本研究開発は「HPCI 戦略分野 4 次世代ものづくり」、並びに「立教大 SFR」から支援を受けている。

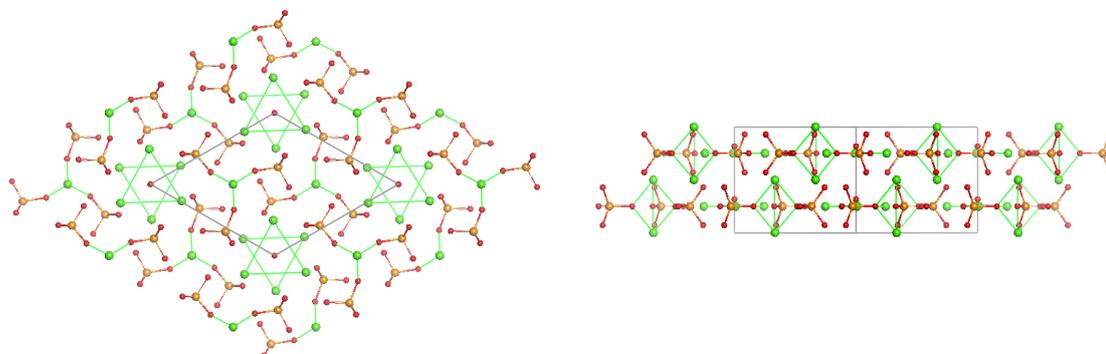


図 1 アパタイトの結晶構造
(緑: Ca、赤: O、オレンジ: P、黒線: 単位胞、緑の線は構造を見やすくするために記載)

[1] Y. Okiyama, T. Tsukamoto, C. Watanabe, K. Fukuzawa, S. Tanaka, Y. Mochizuki, *Chem. Phys. Lett.* **566**, 25-31 (2013)