

フラグメント分子軌道計算のナノバイオテクノロジーへの展開(その1)

Application of fragment molecular orbital calculations to nano-biotechnology field #1

立教大理¹, 東大生産研², みずほ情報総研³, 産総研⁴, JSOL⁵ ◯望月 祐志^{1,2}, 福澤 薫^{1,2,3},
加藤 幸一郎³, 沖山 佳生², 塚本 貴志³, 宮部 寛志¹, 都築 誠二⁴, 古明地 勇人⁴, 小沢 拓⁵,
大島 広介⁵, 渡邊 千鶴², 永田 大樹¹, 豊島 輝¹, 酒井 泉美¹, 奥脇 弘次¹
Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo², Mizuho IR³, AIST⁴, JSOL⁵ ◯Yuji Mochizuki^{1,2}, Kaori Fukuzawa^{1,2,3},
Koichiro Kato³, Yoshio Okiyama², Takayuki Tsukamoto³, Kanji Miyabe¹, Seiji Tsuzuki⁴,
Yuto Komeiji⁴, Taku Ozawa⁵, Kosuke Ohata⁵, Chiduru Watanabe², Hiroki Nagata¹,
Akira Toyoshima¹, Izumi Sakai¹, Kouji Okuwaki¹

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】フラグメント分子軌道(FMO)法[1,2]は、並列処理を駆使してタンパク質の全電子状態計算を実用的に行える手法である。これまでは、主に創薬や生物物理のバイオ系分野で使われてきたが、最近ではナノバイオ系への FMO 計算の適用も図られつつある[2]。こうした中、私たちは 4 体補正の FMO スキーム(FMO4)[3]によってシリカ表面とペプチドの複合系の相互作用解析[4]を行い、2013 年秋期年会でも報告した[17a-C6-1]。また、逆相液体クロマトグラフィーの分離過程の分子論的理解の端緒として、分子動力学(MD)と FMO を併用した研究を 2014 年春期年会で発表している[19p-E17-8]。今回の講演では、これらの結果を総論的に踏まえ、アパタイト結晶の FMO4 モデリング、高分子の粗視化 MD ソフトである Octa[5,6]用の χ パラメータ算定の試みを紹介する。

【事例 1】アパタイトは $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{X}$ (X = OH, F, Cl 等) の組成式で表されるイオン結晶で、X=OH のヒドロキシアパタイトは歯や骨の主成分である。インプラントの表面改質などを合理的に行うには生体分子との相互作用の解明が重要である。ここでは、千原子を超える巨大結晶の扱い、並びにアミノ酸残基/ペプチドの表面結合状態についての解析を報告する。

【事例 2】 χ パラメータは粗視化 MD の信頼性に大きく影響するが、イオン性や分極が大きい系では設定に試行錯誤が伴う[5]。今回は、FMO 計算の相互作用エネルギー[2]と χ パラメータとの対応関係をニトロベンゼン/ヘキササン混合系等に対して調べた予備的な結果を示す。

【謝辞】本研究開発は「HPCI 戦略プログラム 分野 4 次世代ものづくり」、及び「立教大 SFR」から支援を受けている。

【文献】 [1] K. Kitaura and D. G. Fedorov edited "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems", (2009, Boca Raton, CRC press). [2] S. Tanaka, Y. Mochizuki, Y. Komeiji, Y. Okiyama, K. Fukuzawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 10310. [3] T. Nakano, Y. Mochizuki, K. Yamashita, C. Watanabe, K. Fukuzawa, K. Segawa, Y. Okiyama, T. Tsukamoto, S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.* **523** (2012) 128. [4] Y. Okiyama, T. Tsukamoto, C. Watanabe, K. Fukuzawa, S. Tanaka, Y. Mochizuki, *Chem. Phys. Lett.* **566** (2013) 25. [5] Octa HP <http://www.octa.jp/index_jp.html>. [6] M. Doi, *J. Comp. Appl. Math.* **149** (2002) 13.