

フラグメント分子軌道法でナノ-バイオ界面を見る

Fragment molecular orbital-based analyses for nano-bio technologies

立教大理¹, 東大生産研², 日大松戸歯³ °望月 祐志^{1,2}, 福澤 薫^{2,3}

Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo², Nihon Univ.³ °Yuji Mochizuki^{1,2}, Kaori Fukuzawa^{2,3}

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】フラグメント分子軌道(FMO)法[1-3]は、タンパク質などの巨大分子系を適当なフラグメント単位に分割し、環境静電ポテンシャル印加下で並列処理を駆使して電子状態計算を実用的に行える手法です。FMO 計算からはフラグメント間相互作用エネルギーなどの解析に有用な情報が得られるので、タンパク質とリガンドの複合系などを対象に創薬や生物物理のバイオ系の分野で使われてきました。しかし、最近ではナノ-バイオ系や非バイオ系への FMO 法の適用も図られつつあります[2,3]。私たちのグループでは独自の FMO プログラム ABINIT-MP を開発し、先導的な応用を行ってきました[3]。本講演では、タンパク質や DNA の相互作用解析、さらに最近のナノ-バイオ界面のモデリングまで、ABINIT-MP を使った FMO 計算の事例をご紹介します。

【ABINIT-MP の特徴】MPI 並列と OpenMP/MPI 混成並列により、PC クラスタから「京」のようなスパコンまで対応しています。クラスタ型サーバでも数十コアあれば、数百残基のタンパク質がルーチン的に処理出来ます。また、専用のインターフェース BioStation によって ABINIT-MP 用の入力データの作成から（膨大な）数値結果の可視的な解析・直観的理解までのワークフローがサポートされています。なお、ドキュメントと例題を含むパッケージとしては東大生産研のサイトから Intel Xeon 用のバイナリが入手可能[4]で、ソースの公開も 2015 年度内を予定しています。

【最近の応用】ABINIT-MP では 4 体フラグメント補正による高精度な FMO4 計算[5]によって、(有バンドギャップの) 固体が扱えるため、固体/生体関係分子/水から成るナノ-バイオの複合系をモデル化することが出来ます。シリカ-ペプチドの例[6]は 2013 年秋の講演会で報告していますが、アパタイト系については本講演会で別途発表する予定です。非バイオ系では、OCTA[7]の粗視化分子シミュレーションに供する χ パラメータ[8]の算定を FMO 法の相互作用エネルギー計算に基づいて非経験的に行うプロトコルを確立しつつあり、ニトロベンゼン-n ヘキサン系、ナフィオン-水系で予備的な結果を得ています。

【謝辞】最近の応用計算で、アパタイトについては加藤幸一郎氏（みずほ情報総研）、粗視化分子シミュレーションについては小沢拓氏（JSOL）らとの共同研究です。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」からご支援をいただいています。

【文献】[1] "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems", (2009, CRC). [2] D. G. Fedorov et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 14 (2012) 7562. [3] S. Tanaka, et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 10310. [4] <<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/software/>>. [5] Nakano et al., Chem. Phys. Lett. 523 (2012) 128. [6] Okiyama et al., Chem. Phys. Lett. 566 (2013) 25. [7] <http://www.octa.jp/index_jp.html>. [8] C. F. Fan et al., Macromolecules, 25 (1992) 3667.