

フラグメント分子軌道計算に基づく有効パラメータを用いる 脂質膜の粗視化シミュレーション

DPD simulation of lipid membrane with effective parameter based on
fragment molecular orbital calculation

立教大理¹, 東大生研², (株)JSOL³, 慶大理工⁴ ○土居 英男¹, 奥脇 弘次¹, 望月 祐志^{1,2},
小沢 拓³, 泰岡 顕治⁴

Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo², JSOL Co.³, Keio Univ.⁴

○Hideo Doi¹, Koji Okuwaki¹, Yuji Mochizuki^{1,2}, Taku Ozawa³, Kenji Yasuoka⁴

E-mail: hideo-doi@rikkyo.ac.jp

【序】分子動力学シミュレーションや Dissipative particle Dynamics (DPD)シミュレーションの実施には、原子や分子の性質を表現するためのパラメータが必要である。また、どのようなパラメータを選ぶかはシミュレーション結果にとって極めて重大である。ところが、現代ですらパラメータ算定やパラメータ開発は非常に難しく、手間のかかる問題である。特に、脂質膜をはじめとする重要な分子ではパラメータが少ない、あるいは存在しないといったことが多い。同じような重要な生体分子であるタンパク質と比較すると顕著である。なぜならば、タンパク質は結晶にすることが可能であり、結晶化しさえすれば X 線結晶解析が可能である。したがって、原子の配置などを知ることが可能である。ところが、脂質膜では結晶化させることが難しいため X 線結晶解析を行うことが難しく、原子の配置や結合長などの情報がわからない。そこで、実験結果を必要としないパラメータ算定プロセスが必要になってくる。そこで、本研究ではフラグメント分子軌道 (FMO) 計算[1]に基づいて DPD シミュレーションのためのパラメータを算出し、実際に DPD シミュレーションを行った。

【計算対象の分子】我々は、膜分子として 1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (POPC) 分子を計算対象として選んだ。次に、POPC 分子を図 1 に示しているようなセグメントに分割し、各セグメントに関して ABINIT-MP[2] を使用し FMO2-MP2/6-31G+計算を行い計算結果から、DPD

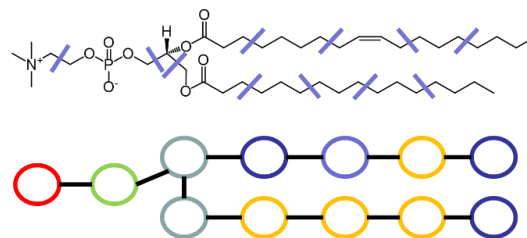


図 1 (上) POPC 分子の構造

(下) DPD シミュレーション中のモデル

シミュレーションに使用するための χ パラメータを算出した。その後、算出した χ パラメータを使用し DPD シミュレーションを行った (参考: 奥脇らによる本学術講演会の発表、並びに春期の発表)。シミュレーションには OCTA/J-OCTA を使用した。[3]

【結果】当日の発表では、DPD シミュレーションとその結果について詳細に紹介する。

【文献】[1] "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems", (2009, CRC). [2] Tanaka et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 10310. [3] <http://octa.jp>, <http://www.j-octa.com> 【謝辞】本研究開発は文科省 FS2020 プロジェクトからの支援を受けている。