フラグメント分子軌道計算に基づくナノ・メソのマルチスケールシミュレーションの展開

Development of nano-meso multiscale simulations of based on fragment molecular orbital calculations

立教大理[1]，東大生研[2]，(株)JSOL[3]，慶大理工[4]，奥脇 弘次[1]，土居 英男[1]，
石川 雄太郎[1]，○望月 祐志[1,2]，小沢 拓[3]，泰岡 顕治[4]
Rikkyo Univ.[1], Univ. Tokyo[2], JSOL Co.[3], Keio Univ.[4], °Koji Okuwaki[1], Hideo Doi[1],
Yutaro Ishikawa[1], ○Yuji Mochizuki[1,2], Taku Ozawa[3], Kenji Yasuoka[4]
E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】巨大分子系を量子論的に扱えるフラグメント分子軌道(FMO)法[1]は、これまでタンパク質や水和凝集系に対して主に用いられてきた[2,3]。こうした中、私たちは自主開発の ABINIT-MP プログラム[3]を用い、J-OCTA システム[4]と連携させて粗視化モデリングのための有効パラメータ[5]をフラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)から算定する試みを行い[6]、散逸粒子動力学(DPD)シミュレーション[7]によって方法論的な有効性を検証してきた。今回は、こうしたナノ-メゾのマルチスケールシミュレーションに関する研究開発をダイジェストして報告させて頂く。

【有効パラメータ算定】DPD シミュレーション(メゾスケール)への接続性の観点から、Fan ら[5]による有効パラメータ算定のフレームワークを活かし、セグメント間の接触エネルギーを FMO-IFIE 計算(ナノスケール)で求め、配位数の見積もりを量子化学的に再決定した距離を使って改良した[6]。水和系の場合は、ポアソン-ボルツマン(PB)モデルによって溶媒和エネルギーを補正する。現在、一連の MSS プロトコルを汎用的なワークフローとして整備しているところである。

【DPD 応用事例】当初からナフィオン-水系をベンチマーク対象としてきたが、水クラスターの連結度の臨界挙動、動径分布関数から小角散乱強度を評価して実験データと定量的に比較出来るようになっている[8]。2016 年度からは、水平展開としてベシクル・脂質膜(POPC)のナノバイオ系へ応用しており、計算された膜面積や膜厚が実験値をほぼ再現することを確認している[9]。脂質膜の分子動力学(MD)シミュレーションはこれまでも多数例が報告されているが、力場パラメータの信頼性、大きな計算資源の要求などが課題となっていた。私たちの MSS 手法は、有効パラメータの決定が非経験的であり、DPD が相対的に MD より低コストで済むために小型サーバで処理出来、多くのケーススタディを手軽に重ねることが可能である。最近では、より工学的な指向から、タイヤの合成ゴム素材、シリカ粒子、カーボンブラックの多成分系の計算も進めている。

【謝辞】本研究開発は文科省 FS2020 プロジェクト（重点課題６）からの支援を受けている。

【文献】[1] "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems", (2009, CRC). [2] Fedorov et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 14 (2012) 7562. [3] Tanaka et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 10310. [4] http://www.j-octa.com/ [5] Fan et al., Macromolecules 25 (1992) 3667. [6] Okuwaki et al., to be submitted. [7] Groot et al., J. Chem. Phys. 107 (1997) 4423. [8] 本学会 2016 年春季学術講演会 <20a-W323-6>. [9] 本学会 2016 年秋季学術講演会 < 14p-B10-3>.

© 2017年 応用物理学会