

FMO-DPD 手法の開発と脂質・タンパク質への応用

Development of FMO-DPD method and related applications to lipids and proteins

立教大¹, 東大生研², 産総研³, (株)JSOL⁴, 星薬科大⁵, 慶応大⁶

○望月祐志^{1,2}, 奥脇弘次¹, 土居英男³, 小沢拓⁴, 福澤薫^{2,5}, 泰岡顕治⁶

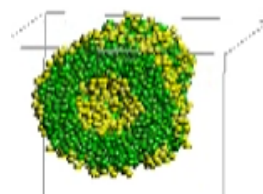
Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo², AIST³, JSOL⁴, Hoshi Univ.⁵, Keio Univ.⁶

°Yuji Mochizuki^{1,2}, Koji Okuwaki¹, Hideo Doi³, Taku Ozawa⁴, Kaori Fukuzawa^{2,5}, Kenji Yasuoka⁶

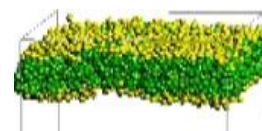
E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】散逸粒子動力学(DPD)[1]は粗視化シミュレーション手法の一つで、対象系のメゾスケール構造を効率的に評価することが出来ます。DPDにおける粒子間の有効相互作用を表す χ パラメータは、これまでは実験値ないしは古典力場に基づいて設定[2]されてきましたが、信頼性と汎用性の点で十分ではありませんでした。そこで私達は、フラグメント分子軌道(FMO)計算[3]に基づいて非経験的に χ パラメータを算定し、DPDシミュレーションを行うFMO-DPD法を開発すると共に先導的応用を行ってきました。本講演では、計算手法と応用事例をご紹介します。

【計算スキームと応用事例】手法開発では奥脇の貢献が大きいです。文献[2]の手法をベースにセグメント対の配置を生成し、ABINIT-MP[4]によるFMO計算を行い、得られた相互作用エネルギーから異方性を考慮した上でモンテカルロサンプリングによって χ パラメータを温度毎に求めます[5]。一連のワークフローはFCEWSとしてシステム化されて公開されています[6]。応用計算としては、燃料電池の電解質膜が形成する水クラスターのメゾ構造のシミュレーション[7]、POPC膜・ベシクルの形成[8](右図参照)とPOPC膜のシリカへの吸着[9]、混合脂質の



脂質13%:ベシクル



脂質20%:膜

ベシクル形成[10]があります(これらのDPDの実行と解析にはJ-OCTA[11]を利用)。文献[7,8,10]では実験値との比較も行い、良好な対応を確認しています。昨年、たんぱく質での水素結合などを柔軟に設定出来る新しいDPDコードCAMUS[12]を土居が開発しました。アミノ酸間の相互作用もFMO計算によって評価し、CAMUSを使ってシニョリン類の量み込みを報告としています[13]。

【謝辞】本研究開発は、ポスト「京」-重点課題6、科研費(16H04635)から支援を受けています。

【文献】[1] Groot et. al., J. Chem. Phys., 107 (1997) 4423. [2] Fan et al., Macromolecules, 25 (1992) 3667. [3] "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems", CRC, (2009). [4] Tanaka et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 10310. [5] Okuwaki et al., J. Phys. Chem. B, 122 (2018) 338. [6] 奥脇ら, J. Comp. Chem. Jpn., 17 (2018) 102. [7] Okuwaki et al., RSC Adv., 8 (2018) 34582. [8] Doi et al., Chem. Phys. Lett., 684 (2017) 427. [9] 土居ら, J. Comp. Chem. Jpn., 16 (2017) 28. [10] 新庄ら, J. Comp. Chem. Jpn., 17 (2018) 172. [11] <<https://www.j-octa.com/>>. [12] Doi et al., CBI-J., 18 (2018) 70. [13] 奥脇ら, 応用物理学会 2018 秋期学術講演会, 19p-222-9.