

Size-Consistent Multipartitioning QM/MM method

○ 渡邊宙志¹, 阪野美紗², Tomas Kubar³,Marcus Elstner³, 櫻井実²¹東大先端研, ²東工大バイオ, ³Kalrsruhe 工科大学

hwatanabe@protein.rcast.u-tokyo.ac.jp

Quantum mechanics (QM)/Molecular mechanics (MM)法はタンパク質などの巨大系にも、量子力学計算の適用を可能にする。QM/MM法では、興味のある溶質や分子の一部に加え、その周辺部位もQM領域に含めるのが一般的である。しかし水分子など自由に動き回る溶媒分子をQM領域に含め時間発展計算を実行する場合、空間的および時間的不連続性の問題が生じる。

空間的不連続性は、QM溶媒とMM溶媒の分子的性質の違いに起因し、QMとMM領域の間に生じる不自然な境界構造を指す。一方、時間的不連続性は、水分子の拡散に伴ってQM領域を再定義し直す際に生じる力とエネルギーの不連続性の問題である。(図1)

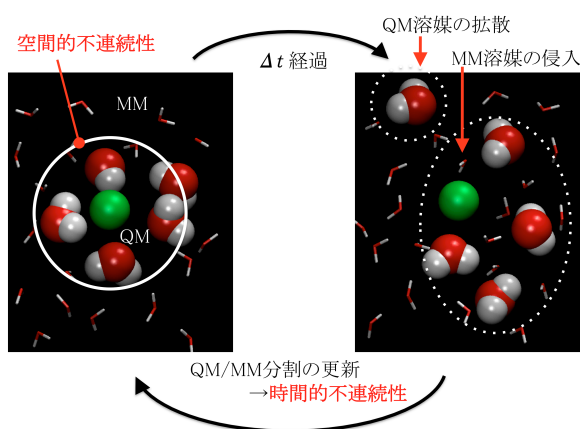


図1: QM/MMにおける不連続性

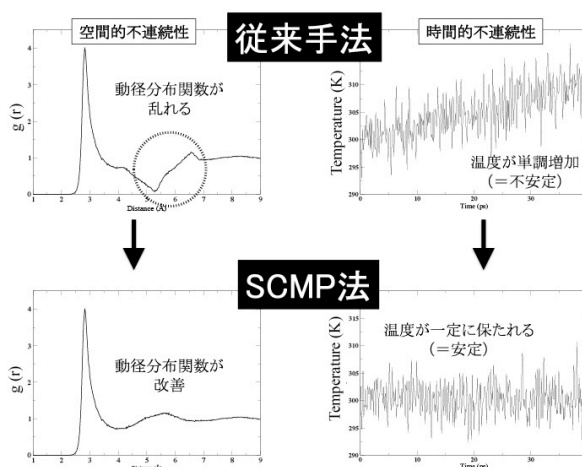


図2: SCMPによる計算の改善点

これら2つの問題を解決するための枠組みは adaptive QM/MM法と呼ばれ、様々な手法が提唱されてきたが、どれも上述の問題を解決するに至っていなかった。そこで我々は第三世代の adaptive QM/MM法として、Size-Consistent Multipartitioning (SCMP) QM/MM法を提唱した。[1]この手法では、同サイズのQM/MM分割を複数用意し、重みをつけて足し合わせることで、エネルギーと力を算出する。その特徴として、従来の adaptive QM/MM法に比べ精度がよく、効率的で必要な計算資源が少なく済む点が挙げられる。

今回の発表で我々は、SCMP法が初めて不連続性の問題を解決し、溶媒の量子効果を取り込んだ時間発展計算を可能にすること、また様々な応用が可能であることを実証するために、水和構造、エネルギー保存、スペクトル計算などの例を示す。[1, 2] (図2)

「参考文献」

[1] Hiroshi C. Watanabe*, Misa Banno, Minoru Sakurai, “An adaptive quantum mechanics/molecular mechanics method for infrared spectrum of water: Incorporation of the quantum effect between solute and solvent”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2016) **18**, 7318-7333

[2] Hiroshi C. Watanabe*, Tomas Kubar, and Marcus Elstner, “Size-consistent multi-partitioning QM/MM: a stable and efficient adaptive QM/MM method” *J. Chem. Theory Comput.* (2014) **10**, 4242-4252.