

量子技術を適用した生命科学基盤の創出  
平成 29 年度採択研究者

2018 年度  
実績報告書

渡邊 宙志

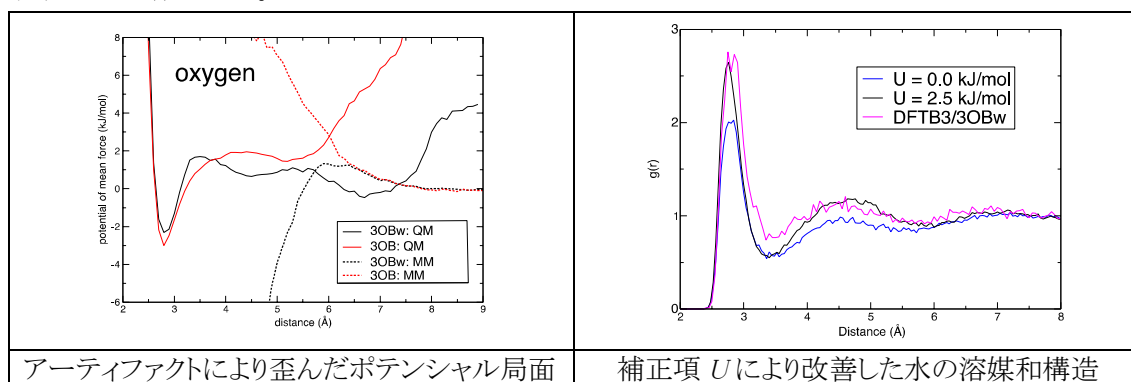
慶應義塾大学量子コンピューティングセンター  
特任講師

量子化学効果を取り込んだタンパク質のシームレスな動的解析法の開発と応用

## § 1. 研究成果の概要

分子シミュレーションにおいて水分子の量子化学効果を動力学シミュレーションに取り込むことは困難である。本研究はこれまで提唱・開発しているシミュレーション手法 size-consistent multi-partitioning(SCMP) QM/MM 法を拡張し、生体分子内部における水分子の量子化学的效果を取り込んだダイナミクスの計算手法を確立・応用することを目的としている。その実現に向けて、本年度は課題の一つである手法の一般化・汎用化を目指した。具体的には現在、SCMP 法は半経験的な量子化学計算手法(DFTB)のみが実装・検証されているが、生体内の反応を取り扱うためには、より高精度の量子化学計算手法が求められる。そこで今年度は、他の量子化学計算手法を SCMP に組み込むために必要な理論的考察と枠組みの構築を行い、ベンチマークおよび計算の効率化を検証した。

その結果、今まで議論されることがほとんどなかったがマルチスケール計算が含んでいるアーティファクトを定量的に算出することに成功した。さらに、これが上述の汎用化の障害となっていることを突き止め、このアーティファクトを補正してより安定し正確なシミュレーションを実現する方法を提唱することに成功した。



## § 2. 研究実施体制

①研究者: 渡邊 宙志 (慶應義塾大学 量子コンピューティングセンター 特任講師)

②研究項目

- ・新しいアルゴリズムの開発
- ・生体系への応用
- ・SCMP 法とFMO 法の融合