

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

水素イオンは我々に非常に馴染みが深く重要な存在であるにも関わらず、分子シミュレーションでは最も取り扱いが難しい対象である。バルクでの電子状態を算出するためには、計算コストの観点から、量子力学(QM)と分子力学(MM)的モデルを組み合わせた QM/MM 法が有利である。しかし Grotthuss mechanism で説明されるように、プロトン輸送は水分子との共有結合の生成と消滅を繰り返されることで進行し、輸送されるのは粒子ではなく構造である。一方、従来の QM/MM 法では QM 領域の中心となる粒子を定義する必要があり、これは計算の最中に更新されることはない。したがって構造が輸送されるプロトン移動の場合は、輸送に伴い計算が破綻してしまう。そこで時間発展のシミュレーションの最中に on-the-fly で QM 中心が切り替わるように、連続的関数で余剰なプロトンの座標を表現する枠組みを提唱した。さらに提唱した表現を我々が過去に開発した adaptive QM/MM に組み込むことで、バルクでのプロトン移動のシミュレーションを実現した。またそれを用いて水素イオンの溶媒和構造や拡散係数が精度良く再現されることも確認した。

