

# 26LA-am02

超高速化量子分子動力学法の開発と代謝反応への応用

○高羽 洋充<sup>1</sup>, 鈴木 愛<sup>2</sup>, Riadh Sahnoun<sup>1</sup>, 古山 通久<sup>1</sup>, 坪井 秀行<sup>1</sup>, 畠山 望<sup>1</sup>, 遠藤 明<sup>1</sup>, 久保 百司<sup>1</sup>, C. A. Del Carpio<sup>1</sup>, 西島 和三<sup>2,3</sup>, 宮本 明<sup>2,1</sup> (東北大院工, <sup>2</sup>東北大未来セ, <sup>3</sup>持田製薬)

【目的】代謝反応ではタンパク質全体も含めた環境場全体が重要な役割を果たすが、そのような大規模反応系を、従来の第一原理的計算手法で取り扱うことは不可能であった。そこで我々は、代謝反応を大規模系で取り扱うために、電子状態変化をあらわに取り扱いつつ、従来法より飛躍的に計算速度を高速化した超高速化量子分子動力学法の開発に成功したので報告する。

【方法】Tight-binding 近似に基づく高速化量子分子動力学法 Colors を利用することで、分子動力学法のパラメータを高速に更新するアルゴリズムを開発した (右図参照)。その結果、従来の第一原理手法と比較し 1000 万倍もの高速化を実現した。

【結果】一例として、P450cam における campher の代謝に適用し、酵素全体のダイナミクス変化も考慮したシミュレーションに成功した。さらに独自の反応時間発展加速化理論を適用して速度定数を求めたところ、実験値と一致し、計算の定量性を確認した。

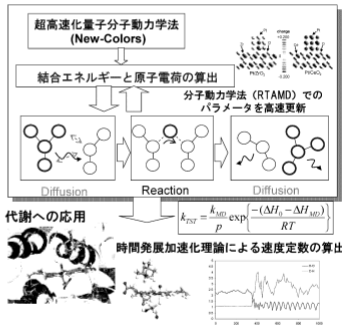


図 大規模代謝反応のシミュレーションのための新規な計算手法の概要