

μ -ADDF 法を用いた離散原子指定による独立変数数削減法での アラニン三量体の立体構造探索

¹和歌山大院システム工、²和歌山大システム工

○高田谷 吉智¹、沖 卓人¹、箕土路 祐希¹、山門 英雄^{1,2}

【序論】タンパク質の折りたたみ問題は、主に分子動力学シミュレーションを用いることで研究が行われている。本研究では、超球面探索法(SHS 法)[1]を用いることで、その問題に取り組むことを考えている。しかしペプチドであっても原子数が非常に多くなるため、現実的な計算時間で $3N-6$ 次元空間中の極小点を見つけ出すことは困難である。そこで本研究では、SHS 法による極小点から鞍点への上り探索は、分子中の離散原子のみとし[2]、 μ -ADDF 法[3]を用いることで計算時間の短縮化を図った。なお立体構造を探索する系は、全て L 体であるアラニンの三量体[4]とした。

【計算方法】図 1 に初期構造および SHS 法による上り探索に用いた離散原子を示す。本研究では、アラニン三量体の計 33 原子中 4 原子を離散原子として指定した。電子状態計算は Gaussian09 を使い、計算方法は B3LYP、基底関数は 6-31G(d) とした。 μ -ADDF 法は GRRM14[5]で実行し、オプションは LADD=3、GauProc=16、GauMEM=500、Derivative=Force、CoupleDist=30 に設定した。

【結果と考察】現在では、平衡構造 5 個と遷移構造 3 個が求まっている。その構造の一部と反応経路図を図 2 に示す。いずれの平衡構造においても、結合の解離が無く探索ができていた。また、アラニン三量体内の各アミノ酸の立体構造は、各平衡構造で大きく異なっていた。これらの構造が求まるまでの計算時間は、約 12 日と 2 時間であった。

【結論】 μ -ADDF 法を用いてペプチドの離散原子のみを指定し、SHS 法により平衡構造を追うことにより短時間で複数の構造が得られた。また、求まった平衡構造の立体構造は、各構造で大きく異なっていた。本研究の手法を用いることで、今後より大きい系に対して立体構造の探索を試みる予定である。

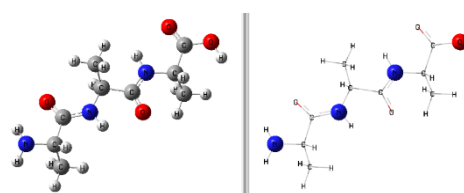


図 1. アラニン三量体の初期構造

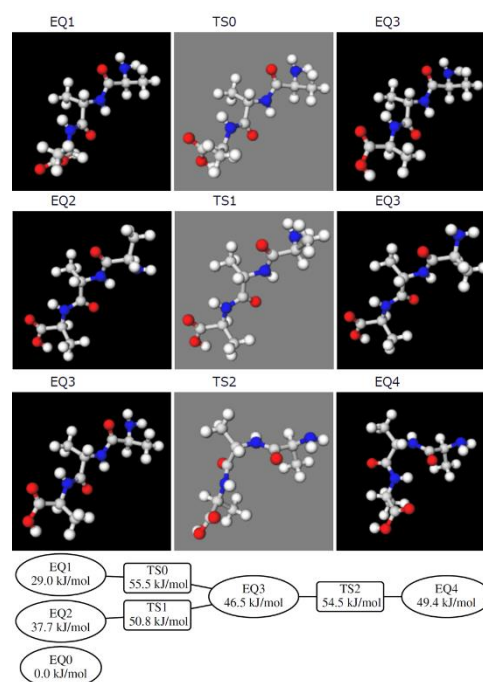


図 2. μ -ADDF 法により求まったアラニン三量体の立体構造

【引用文献】

[1] K. Ohno and S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.*, 2004, **384**, 277; S. Maeda and K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 2005, **109**, 5742; K. Ohno and S. Maeda, *J. Phys. Chem. A*, 2006, **110**, 8933. [2] H. Yamakado, T. Oki, Y. Midoro, Y. Kodaya, *22th rironkagaku-touronkai*, 2019, P2. [3] S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, *J. Chem. Theory Comput.*, 2009, **5**, 2734. [4] C. Fujimoto, A. Shinozaki, K. Mimura, T. Nishida, H. Gotou, K. Komatsu and H. Kagi, *Chem. Commun.*, 2015, **51**, 13358. [5] S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, K. Ohno, see <http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/> (accessed date 31 August, 2019).