

演 題	基準振動解析における ONIOM 法の計算精度の検証	
発 表 者 ( 所 属 )	○柳井雄樹, 石丸雄一, 吉田 弘, 松浦博厚 (広島大学大学院理学研究科)	
連 絡 先	〒739-8526 東広島市鏡山 1-3-1 広島大学大学院理学研究科 TEL 0824-24-7101 FAX 0824-24-0727 e-mail: yoshida@molda.org	
キ ー ワ ー ド	密度汎関数法, ONIOM 法, 振動スペクトル	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	本研究では, 巨大分子の理論的取り扱いにおいて有効な ONIOM 法による基準振動解析の計算精度を検証することを目的として, トルエンの基準振動解析を行い, さらに生体分子への応用としてヌクレオチドの振動解析も行った。	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	
	ソ ー ス 言 語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法
	・未定	

## 1. はじめに

生体系など巨大分子に対する完全な量子化学計算は, 計算時間からみても現段階では不可能とってよい。しかし, 近年, このような問題に対しさまざまな研究がなされている。その中の一つである ONIOM 法は分子を二つまたは三つの層に分けそれぞれに異なるレベルの理論を対応させる計算法である<sup>1)</sup>。これにより, 研究に必要な部分の構造のみ高いレベルの理論を適用させることができ, 計算の簡略化が図れる。本研究では, この ONIOM 法の基準振動解析における計算精度を検証することを目的として, まずさまざまな同位体種について精密な基準振動解析がなされているトルエンの振動計算を行った。さらに, 生体分子への応用を目指して, ヌクレオチドの振動解析も行った。

## 2. 計算方法

ONIOM 法による基準振動計算は Gaussian98 を用いた。トルエンについてはベンゼン環に B3LYP/6-311+G\*\*を適用し, メチル基に HF 法, AM1 法, UFF 法の三種類の計算方法を適用した。ヌクレオチド(dTMP, dAMP)に関しては, 図 1 の丸で囲んだ核酸塩基部分に B3LYP/6-311+G\*\*を適用し, リン酸-糖

鎖部分に HF 法, AM1 法, UFF 法の三種類の計算方法を適用し比較した。このような指定により, 量子論的な効果の大きな芳香族環部分を精密に計算することができる。

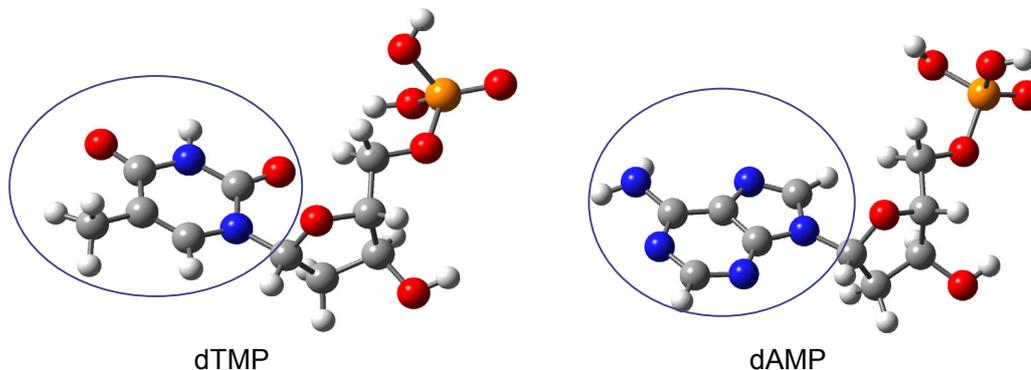


図1 dTMP および dAMP における ONIOM 法の適用範囲

### 3. 結果と考察

図2に, トルエンにおいてAM1法と組み合わせた ONIOM法の計算波数値と実測波数値を比較したプロットを示す。B3LYP法を用いたベンゼン環部分の振動計算の結果は実測値とかなり良い一致を示し, ONIOM法の計算精度は十分高いことがわかる。また, dAMPのリン酸-糖鎖部分について, さまざまな手法で行った結果を表1に示す。全体的に, 計算波数値は実測波数値<sup>2)</sup>とよい一致がみられた。しかし, dAMPにおいて, NH変角振動と関係するバンドが10%以上くいちがっている。これは, NH結合が水素結合と関係しており, 計算を行った環境(真空中)と実際に測定を行った環境(水溶液中)とが異なっているための効果が現れたためと考えられる。

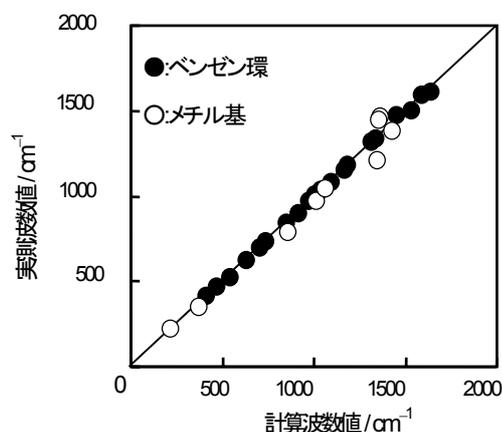


図2 トルエンの計算波数値と実測波数値

表1 共鳴ラマン分光法による塩基部分実測波数値( $\text{cm}^{-1}$ )と ONIOM 法による計算波数値( $\text{cm}^{-1}$ )

振動モード	実測	AM1	誤差	HF/STO-3G	誤差	UFF	誤差
Ring breathing	730	706	-3.3%	745	2.1%	778	6.6%
NH bend	1173	1039	-11.4%	1040	-11.3%	1013	-13.6%
CN str.	1208	1149	-4.9%	1148	-5.0%	1170	-3.1%
CH bend	1250	1290	3.2%	1295	3.6%	1275	2.0%
CH bend	1310	1255	-4.2%	1247	-4.8%	1291	-1.5%
CN str.	1336	1325	-0.8%	1337	0.1%	1384	3.6%
CN str.	1424	1461	2.6%	1459	2.5%	1462	2.7%
CH bend	1482	1454	-1.9%	1490	0.5%	1484	0.1%
CC str.	1580	1563	-1.1%	1565	-0.9%	1558	-1.4%
NH2 bend	1603	1575	-1.7%	1613	0.6%	1519	-5.2%

1) M. Svensson, S. Humbel, R. D. J. Froese, T. Matsubara, S. Sieber and K. Morokuma, *J. Phys. Chem.*, **100**, 19357 (1996).

2) Z. Q. Wen, G. J. Thomas Jr., *Biopolymers*, **45**, 247 (1998).