

2P10 レプリカ交換法による長鎖状分子のモンテカルロシミュレーション

上田 洋輔○山田 祐理、片岡 洋右
法政大学工学部物質化学科

[レプリカ交換(RE)法]

等価な相互作用していない系(レプリカ)複数個で構成される全体系を考える。各レプリカには異なる温度が割り当てられ、初めは全てのレプリカに同じ分子を配置する。各レプリカ系で独立にメトロポリスシミュレーションを行い、定期的に隣接するレプリカ間で図1のように分子配置を交換する。高温から低温に冷却して最適解を見つける従来の方法(Simulated Annealing: SA)だと極小値にトラップされ最小値に辿り着けないことがあったが、この方法だと局所的エネルギー構造にトラップされにくくなるので位相空間を広範囲に検索できる。

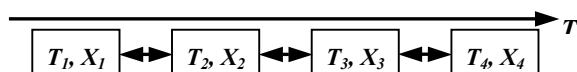


図1. レプリカ交換のイメージ

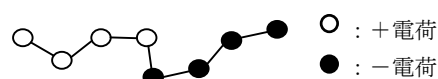
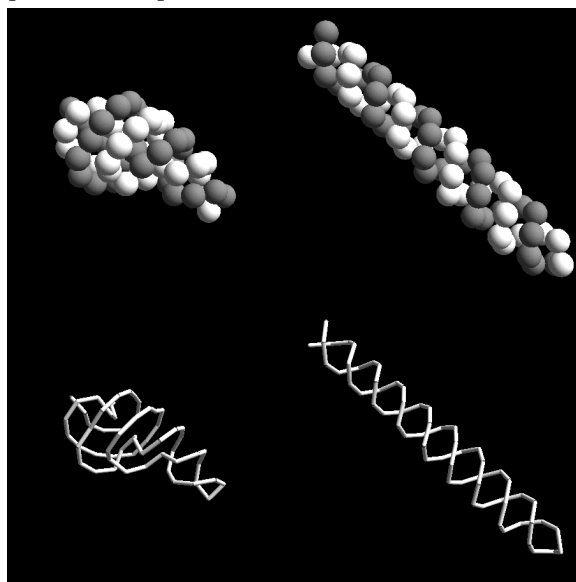


図2. モデル

[計算]

30個の正の電荷と30個の負の電荷を持った、全体で60個のmonomerからなる図2のような分子が一本ある系を考えた。分子内ポテンシャルは、クーロン力、バネ相互作用、ソフトコア相互作用の和で表される。

[結果と解析]



REMCによる計算結果のスナップショットを図3に示す。左はバネ相互作用の強い場合、右は弱い場合の計算結果である。前者は半径が均一でない二重螺旋構造をしていて、中央付近で螺旋の回転方向が逆になっている。一方後者は、タンパク質の二次構造のひとつである α -helixによく似た形をしている。クーロン力とソフトコア相互作用の点において、バネの柔らかい方が安定であり、REMCはバネ相互作用のとり方によって、SAより容易に安定構造を探索できることが分かった。

今回の研究ではレプリカ交換モンテカルロ法を用いてタンパク質を単純モデル化した長鎖状分子をシミュレートし、安定な熱平衡構造を得ることができた。単純なモデルではあるが、実際のタンパク質にあるような二重螺旋構造を得ることができたのは興味深い結果である。また、隣接monomer間の結合エネルギーを表すバネ相互作用のパラメータを変えることで、低温での分子の挙動に差が見られることが分かった。

[参考文献]

- H. Shimizu, "Structural Phase Transition of Di-block Polyampholyte," *Mol. Sim.* **22**, 285 (1999).
K. Hukushima and K. Nemoto, "Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations", *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1604 (1996).