

## 電荷平衡法による分子力場ポテンシャルの開発

○中山尚史<sup>1,2</sup>、小畑繁昭<sup>1</sup>、後藤仁志<sup>1</sup><sup>1</sup>豊橋技術科学大学 (〒441-8580 愛知県豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1)<sup>2</sup>科学技術振興機構 (〒332-0012 埼玉県川口市本町4-1-8)

【序論】分子シミュレーションにおいてポテンシャルエネルギーにおける静電的な相互作用の見積もりは、極めて重要な寄与をすることが知られている。従来の分子シミュレーションでは、分子内あるいは系における静電的なエネルギーを各原子上に置いた点電荷同士のクーロン相互作用として求めるのが一般的である。しかしながら各原子上に置く部分電荷を一定とする場合、構造変化による静電場の変化を記述することは不可能である。

我々は最近、精度の高い力場として注目されている Merck Molecular Force Field [1] (以下 MMFF) の静電相互作用部分に、有機分子の双極子能率を再現するようにパラメーターを分割・最適化した新規電荷平衡法 (以下 NQEq) [2]を導入した力場 (以下 MMFF/NQEq) を開発した。本発表では、NQEq の概要と MMFF/NQEq 力場により計算した結果について報告する。

【計算手法】MMFF 力場における全エネルギーは、以下の式により計算される。

$$E_{MMFF} = \sum EB_{ij} + \sum EA_{ijk} + \sum EBA_{ijk} + \sum EOOP_{ijkl} + \sum ET_{ijkl} + \sum EvdW_{ij} + \sum EQ_{ij}$$

この式の最後の項 EQ が静電相互作用を表しており、Bond charge increment により求めた部分電荷を用いて計算を行っている[1]。この静電相互作用エネルギーを、NQEq において用いられるエネルギー表式に置き換えるとともに、解析的微分式による一次、二次微分計算ルーチンを導入し、最適化により構造が変化する毎に電荷分布を再計算するようにプログラムを作成した。

NQEq による系の全エネルギーは右の式によって表される。ここで  $Q_A$  は部分電荷、 $J_{AB}$  は NQEq における 2 中心電子間反発をそれぞれ表しており、本研究では西本-又賀式を用いている。 $\chi_A^0$  と  $J_{AA}^0$  は、MMFF 力場における原子タイプを参考に分割し最適化を行った。

$$E^{vac}(Q_1 \cdots Q_N) = \sum_A E_A(Q_A) + \sum_{A > B} Q_A Q_B J_{AB}$$

$$E_A(Q_A) = E_{A0} + \chi_A^0 Q_A + \frac{1}{2} J_{AA}^0 Q_A^2$$

【結果】MMFF 力場のパラメーター決定に用いられた種々の化合物における配座間エネルギー ( $\Delta E$ ) を、従来の MMFF 力場および MMFF/NQEq 力場を用いてそれぞれ構造最適化して得られたものと、ab initio 計算 (MP4SDQ/TZP//MP2/6-31G\*) によって得られたものとの差 ( $\Delta\Delta E$ ) をそれぞれ表 1 に示す。

表 1 : MMFF および MMFF/NQEq によるエネルギー差の比較 (kcal/mol)

Force Field	RMS $\Delta\Delta E$	Max $\Delta\Delta E$
Original MMFF	0.298	1.56
MMFF/NQEq	1.649	6.72

今後は NQEq パラメーターの改良および MMFF 力場部分のパラメーターの修正を行い、ab initio 計算の結果を再現する高精度な力場の構築を行う予定である。

【参考文献】

[1] T. A. Halgren, *J. Comput. Chem.*, 1996, **17**, 490.

[2] A. K. Rappé, W. A. Goddard III, *J. Phys. Chem.*, **95**, 3358 (1991).