

MMFF/NQEq 力場の構築：(2) アルコール、エーテル

○中山尚史、小畑繁昭、後藤仁志

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)

【序論】分子シミュレーションにおいて、用いる力場に含まれる静電相互作用の精度が、シミュレーション計算の信頼性に対して大きな影響を与えることが知られている。近年、既存の力場に含まれる従来の静電相互作用項に対して、構造最適化等による核座標の変更に応じて分極が誘起される効果を導入した計算手法に置き換えて、シミュレーションの精度を高める研究が盛んに行われている。

我々は最近、有機分子の双極子能率を再現するようにパラメータを分割・最適化した新規電荷平衡法 (以下 NQEq) [1,2]を開発した。またこれを、近年精度の高い力場として注目されている Merck Molecular Force Field [3] (以下 MMFF) の静電相互作用部分に導入した MMFF/NQEq 力場を開発し[4]、MMFF94 の原論文に含まれている炭化水素について、29組の配座間相対エネルギー (以下配座エネルギー) の *ab initio* 計算 (MP4SDQ/TZP//MP2/6-31G*) の結果を、ねじれ相互作用項のパラメータを最適化することによって従来よりも定量的に再現することに成功した[5]。

本研究では、この新規力場の有用性をさらに高めるため、アルコールおよびエーテル類の計算に必要なパラメータの最適化を行った。また得られたパラメータを用いて、原論文に含まれているアルコール・エーテルや環状六炭糖の一つである α -D-glucopyranose の配座エネルギーを求め、その結果を *ab initio* 計算と比較した。

【計算手法】MMFF/NQEq 力場におけるねじれ相互作用 ET_{ijkl} は、MM3 などと同様に

$$ET_{ijkl} = 0.5(V_1(1 + \cos\Phi) + V_2(1 - \cos 2\Phi) + V_3(1 + \cos 3\Phi))$$

で表される。パラメータの最適化は、炭化水素の場合と同じように文献中にある *ab initio* 計算 (MP4SDQ/TZP//MP2/6-31G*) により求めた配座エネルギーを再現するように最適化した。

【結果と考察】Ethanol、n-Propanol、および Isopropanol について、20組の配座エネルギーを比較したものを右表に示す。表より、パラメータの最適化によって従来の MMFF94s 力場よりも *ab initio* 計算の結果を定量的に再現していることがわかる。

他のアルコールとエーテル、および α -D-glucopyranose に関する計算結果の詳細は、当日報告する。

【謝辞】本研究の一部は、科学研究費補助金 (基盤研究 (B) : 課題番号 17300094) の支援を受けて行われた。

【参考文献】

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

[2] 中山、長嶋、後藤、2003分子構造総合討論会 4Bp05

[3] T. A. Halgren, *J. Comput. Chem.*, 1996, **17**, 490; 520; 553; 587; 615; T. A. Halgren, *J. Comput. Chem.*, 1999, **20**, 720; 730.

[4] 中山、後藤、日本コンピュータ化学会2004春季年会 1P28

[5] 中山、小畑、後藤、日本コンピュータ化学会2005春季年会 1O02

表 : MMFF94s および MMFF/NQEq による Ethanol、n-Propanol、および Isopropanol の配座エネルギーの比較

Force Field	RMSD
MMFF94s	0.17
MMFF/NQEq (before opt.)	0.20
MMFF/NQEq (after opt.)	0.14