

## 2P11 大規模分子に対する FMO-MO の計算精度

○稲富雄一（九大情基センター）、梅田宏明、渡邊寿雄、長嶋雲兵（産総研、CREST）

タンパクの活性部位の位置、ならびに反応機構を理論的に解析する際に、フロンティア分子軌道が1つの重要な情報となる。フロンティア軌道を非経験的に求めるために、従来は Hartree-Fock 法やそれに類似の計算手法を用いることが多い。しかしながら、計算量が  $O(N^4)$  であり、記憶装置の容量の制限などから、膨大な計算時間を必要とするため、そのまま、大規模分子に適用することは困難であった。フラグメント分子軌道(FMO)法における分子軌道(FMO-MO)は、このような困難を克服するために提案された計算手法である。FMO-MO 法の計算に必要な主要な3つの計算ステップ、(1) FMO 計算、(2) FMO における密度行列を用いた Fock 行列計算、および、(3) フロンティア軌道付近のみの固有値、固有ベクトルを求めるための一般化固有値問題求値は、それぞれの問題の特性から、並列処理向きの計算手法であるため、PC クラスタなどの並列計算機を用いることで、高速に分子軌道の計算を行うことができる。しかし、これまでは、小規模な polyglycine ((Gly)<sub>n</sub>(n=5-20)) でのみ、詳細な精度検証が行われているだけで、FMO-MO 法の計算対象である大規模分子での計算精度については不明であった。そこで、今回は殺菌作用を持つ酵素として知られている Lysozyme (129 アミノ酸残基、1,961 原子) に対する従来法、ならびに FMO-MO 計算を行い、大規模分子に対する FMO-MO 法の精度検証を行った。

図1は、HOMO、LUMO 付近の固有値分布の様子を示したものである。この計算には、基底関数として STO-3G を使い、当研究室で開発したプログラムを用いて計算を行った。この図の下から順に、従来法(HF 法)、FMO-MO 法、FMO 計算の途中で得られる monomer、ならびに、FMO 計算の途中で得られる dimer の、それぞれの固有値分布を表している。これを見ると、まず、FMO-MO 法は従来法の固有値分布をうまく再現していることが分かる。一方、FMO 法の途中で得られる、モノマー、ダイマーの固有値分布は、従来法の結果と大きく違うことが分かる。ただし、この系が9価の陽イオン状態であるために HOMO、LUMO の位置が負の方向にシフトしている状況を、FMO の結果でもうまく再現できているため、FMO-MO 法で必要な一般化固有値問題求値の際に、重要な情報になると考えている。

図1： Lysozyme の HOMO、LUMO 付近の固有値分布状況（基底関数 STO-3G、6,005 関数）

