

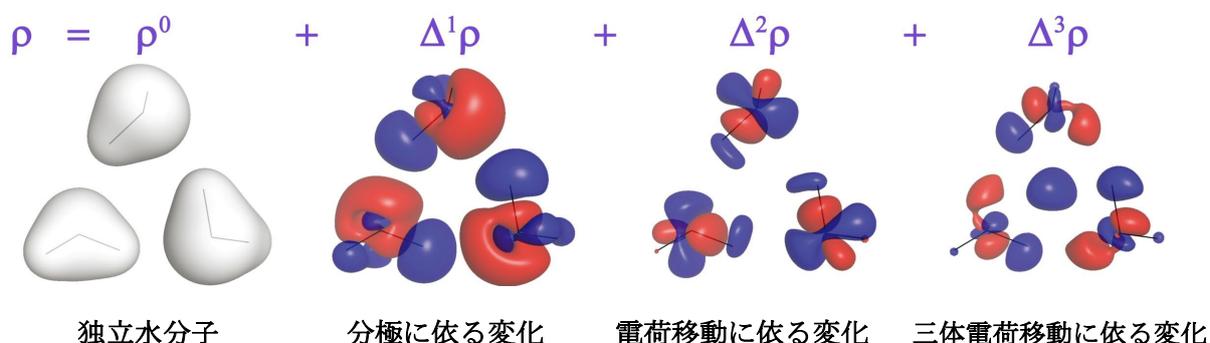
巨大分子系の量子化学計算が生み出す相互作用の描像

(産業技術総合研究所・CD-FMat) Dmitri G. Fedorov

量子化学計算を高速に行う為、フラグメント化が魅力的である。フラグメント分子軌道法(FMO法)は1999年から日本を始め、世界中に開発されている。巨大分子系をアミノ酸残基等のフラグメントに分割し、それぞれのフラグメントの値を足し、全系の物性を得られる。

FMO法を用いて、巨大分子系の構造最適化、遷移状態探索、振動数計算、動力学模擬等が出来る。亦は、閉殻基底状態のみならず、開殻電子状態、或いは励起状態の計算も可能である。

FMOに使われる多体展開は深い物理的描像と繋がり、静電相互作用、分極、電荷移動、交換反撥、分散力の寄与を定義し、複雑な巨大系の理解を分かり易い描像で表す事が出来る。例えば、水の液体中の相互作用に依って電子密度の寄与を解析出来る。



電子密度と同様にエネルギーの解析も出来て、それを以って酵素反応、蛋白質に於けるリガンド認識等の解明を行っている。亦は、相互作用の熱揺らぎに依る影響も算出する計算法を開発し、水と中蛋白質複合体に応用した。

FMOのプログラムとして、ABINIT-MP, GAMESS, PAICS等が無償公開されている。計算の準備と結果の解析に役立つ無償公開のGUIもFacio等がある。

参照

- [1] 情報提供。 <http://staff.aist.go.jp/d.g.fedorov/fmo/main.html> .
- [2] 論評。 D. G. Fedorov. The fragment molecular orbital method: theoretical development, implementation in GAMESS, and applications. WIREs: Comp. Mol. Sc. 7 (2017) e1322.
- [3] 相互作用解析。 D. G. Fedorov, K. Kitaura. Pair interaction energy decomposition analysis for density functional theory and density-functional tight-binding with an evaluation of energy fluctuations in molecular dynamics. J. Phys. Chem. A 122 (2018) 1781-1795.

日時 : 2019年1月30日 17:30~18:30

場所 : 工学部共通棟 305 講義室

言語 : 日本語

世話人 : 石川岳志 (工学部化学生命工学科・ishi@cb.kagoshima-u.ac.jp)