

## 新しい分子動力学シミュレーション手法の開発と生体分子への応用



奥村 久士 (准教授)

1998年慶應義塾大学理工学部卒業 2002年同大学大学院理工学研究科博士課程修了 博士(理学) 東京大学工学系研究科日本学術振興会特別研究員(PD) 分子科学研究所助手、名古屋大学大学院理学研究科COE特任講師、ラトガース大学研究助教授を経て2009年5月より現職  
TEL: 0564-55-7277 FAX: 0564-55-7025  
電子メール: hokumura@ims.ac.jp

専門領域

構造分子科学専攻

タンパク質などの生体分子には多くの自由エネルギー極小構造があります。このため通常の分子動力学シミュレーションではこれらの極小構造にトラップされてしまい、広い範囲の構造を探索できません。そこで生体分子の分子動力学シミュレーションをより効率的におこなう新しい手法を開発しています。現在興味ある研究テーマは以下のとおりです。

マルチバリーク・マルチサーマル法の開発<sup>1)</sup>

温度や圧力を変えると分子の形は変わります。特に生体分子について温度や圧力を変えたときの構造の変化を理論的に研究することはこれまで困難でした。この問題を解決するためマルチバリーク・マルチサーマル法を提案しました(図参照)。この方法を使うと生体分子の各構造のエンタルピー差や体積差を精度良く計算できます。エンタルピー差と体積差は各構造の存在確率がそれぞれ温度、圧力とともにどのように変化するかを示す重要な物理量です。これらの物理量を分子シミュレーションで求めたのは本研究が初めてです。この方法を用いることにより高温・高圧下での生命現象を理論的に解析できると考えています。

部分的マルチカノニカル法の開発<sup>2)</sup>

これまで提案されてきたシミュレーション手法には大きな系に適用できないという問題がありました。この問題を解決するた

めに部分的マルチカノニカル法を提案しました。この方法では重要なポテンシャルエネルギー項についてだけ広くサンプルするので大きな系にも適用しやすくなります。この手法をタンパク質の折りたたみシミュレーションに応用しようと考えています。

剛体分子の定温シンプレクティック分子動力学法の開発<sup>3)</sup>

シンプレクティック分子動力学法と総称される手法では長時間シミュレーションを実行してもハミルトニアン<sup>3)</sup>の誤差が生じません。私はカノニカルアンサンブル、定温定圧アンサンブルにおいて剛体分子のシンプレクティック分子動力学シミュレーションをおこなう手法を提案しました。この手法を用いると時間刻み幅を4 fsに設定した場合でもハミルトニアンはよく保存します。これは時間刻み幅を従来のアルゴリズムにおける値0.5-2 fsよりも長く設定でき、高速かつ安定にシミュレーションをおこなえることを示しています。この手法はタンパク質や水分子の分子動力学シミュレーションを高速化するために有効な手法です。

## 参考文献

- 1) H. Okumura and Y. Okamoto, "Temperature and pressure dependence of alanine dipeptide studied by multibaric-multithermal molecular dynamics simulations," *J. Phys. Chem. B* **112**, 12038-12049 (2008).
- 2) H. Okumura, "Partial multicanonical algorithm for molecular dynamics and Monte Carlo simulations," *J. Chem. Phys.* **129**, 124116 (9 pages) (2008).
- 3) H. Okumura, S. G. Itoh and Y. Okamoto, "Explicit symplectic integrators of molecular dynamics algorithms for rigid-body molecules in the canonical, isobaric-isothermal, and related ensembles," *J. Chem. Phys.* **126**, 084103 (17 pages) (2007).

