

拡張アンサンブル密度汎関数分子動力学法による ATP 加水分解の研究
Calculation Study on ATP hydrolysis by generalized-ensemble DFT-MD method

岡本祐幸^{1,2,3,4}

Yuko Okamoto^{1,2,3,4}

¹名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻（物理系）、²同大学院理学研究科附属構造生物学研究センター、³同大学院工学研究科附属計算科学連携教育研究センター、⁴同情報基盤センター

¹Department of Physics, Graduate School of Science, Nagoya University, Nagoya, Aichi 464-8602, Japan, ²Structural Biology Research Center, Graduate School of Science, Nagoya University, Nagoya, Aichi 464-8602, Japan, ³Center for Computational Science, Graduate School of Engineering, Nagoya University, Nagoya, Aichi 464-8603, Japan, ⁴Information Technology Center, Nagoya University, Nagoya, Aichi 464-8601, Japan

アデノシン三リン酸 (ATP) は生体内でアデノシン二リン酸 (ADP) とリン酸に加水分解されることによって、生体内のエネルギー供給源となっており、様々な生命現象で利用されている。しかし、その化学エネルギーの発生機構は未だ完全な理解が得られていない。本研究課題では、この生命現象に必須の化学反応を、独自に開発する拡張アンサンブル密度汎関数分子動力学法を適用することによって、自由エネルギー計算を行い、定量的な解積を得ることを目的とする。申請者はこれまで主に生体系の古典力学に基づく分子シミュレーションの分野において、多くの拡張アンサンブル法 (generalized-ensemble algorithm、モンテカルロ法の基礎と拡張アンサンブル法についての最新の教科書としては文献[1]を参照されたい) を開発してきたが、本課題は、化学結合の開裂が必要であり、古典力学では表せない。よって、密度汎関数分子動力学法によって、量子効果を取り入れることにする。申請者のこれまでの拡張アンサンブル法の経験を密度汎関数法の分野に適用するものである。ちょうど、最近、焼き戻し傘サンブル法 (Simulated Tempering Umbrella Sampling: STUS) という新しい拡張アンサンブル法を開発して、それを密度汎関数分子動力学法と組み合わせて、マロンアルデヒドのプロトン移動の精度の高い自由エネルギー計算に成功した[2]ところであり、ここではこの結果を中心に発表を行う。

[1] 岡本祐幸、「拡張アンサンブル法」、*計算科学講座 第9巻「超多自由度系の最適化」* 第2章 (古橋武、笹井理生 編、共立出版、2013) pp. 119-241.

[2] Y. Mori and Y. Okamoto, *Phys. Rev. E* **87**, 023301 (2013).