

Title	FMO-QMC法を用いたDNAの分子間力結合に関する研究
Author(s)	対馬, 孔聖
Citation	
Issue Date	2009-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/8112
Rights	
Description	Supervisor: 前園涼, 情報科学研究科, 修士

FMO-QMC法を用いた DNAの分子間力結合に関する研究

対馬 孔聖 (0710050)

北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科

2009年2月5日

キーワード: 電子状態計算・量子モンテカルロ法・変分モンテカルロ法
フラグメント分子軌道法・分子間結合・電子間相互作用エネルギー.

論文の要旨

本件では、計算機シミュレーションの分野で電子レベルの物質・材料を対象に据え、量子力学を基礎理論におく電子状態計算を行う。現在の電子状態計算の分野には、従来の計算手法では扱うことが困難な系が存在する。その系の一つに、生体系で重要な意味をなす分子間結合（分子間相互作用）が挙げられる。従来手法が不得手とする理由は、分子間結合の大部分が「揺らぎ」に起因するエネルギーと考えられているからである。従って電子-電子間の相互作用（電子間相互作用）をより正確に計算する必要がある。本件では対象に対する汎用性と物理定数以外のパラメーターは用いないことで客観性を持つとされる、第一原理（*ab-initio*）計算手法の一つを採用し、分子間結合に適用することを試みる。

分子間結合をターゲットに据えた典型的な系にDNAの構造を保持する分子間結合がある。それを記述する為に適用する計算手法は、電子間相互作用をより高い信頼性で評価すると考えられている量子モンテカルロ法（QMC）である。しかし現実的には系の全てを一度に計算することは困難とされている。そこでDNAのように生体系の分子構造が、しばしば原子が密な部分と疎な部分に分けて見られることに注目し、密な部分（フラグメント）ごとに分割して、計算の小規模化を可能にした計算の枠組みがある。それがフラグメント分子軌道法（FMO法）である。本件ではこのFMO法と、QMC法のうちで簡便な手法とされる変分モンテカルロ法（VMC）を組み合わせる結合の記述を試みる。

その為に用いられる解析方法は、系の全エネルギーを解析する方法と、フラグメント間相互作用エネルギー（IFIE）を解析する方法がある。更に本件では、IFIEを構成するフラグメントペアエネルギーによって結合が論じられることを見出した。いずれにせよエネルギー評価エンジンにVMCを適用することで、エネルギーのフラグメント間距離依存性を表し、従来手法よりも正確な結合の記述を期待される。

これを実際に行った結果、VMC 計算を用いた分子間結合の再現は叶わなかった。原因は各点独立して計算が行なわれるため各点ごとにバイアスが異なるので、出力される点の間に系統的な依存性が失われたと予想される。そこでバイアスの一因と考えられる一つの要因として、VMC 計算前の準備計算で用いる電荷密度を統計誤差を含まない方法 (HF-VMC) で計算し、それを用いて結果が改善されるかを検証した。しかし結果に大きな改善は見られず、電荷密度には問題の原因は無いと思われる。

これ以外の原因として考えられるものには、波動関数を厳密解に近づける為に施すカスプ補正と試行関数に付与するジャストロー因子の最適化がある。すなわちこれらの処理が各点別々に行われ、その処理の質が一定でない為に出力された点の間の依存性が損なわれたと予想される。今後は準備計算時に実行するスキームに注目し、これの改善を目指した議論が必要になる。