

## Press Release

### 1万原子以上を持つ複雑系分子を超高速シミュレーション ～生体分子の構造予測、電子材料の開発に活用～

名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 (ITbM) のステファン・イレ (Stephan Irle) 教授、西本佳央 (大学院生) および産業技術総合研究所 (AIST) のドミトリ・フェドロフ (Dmitri Fedorov) 研究員は、100万原子以上を持つ分子を高速で解析する新しいコンピューターシミュレーション法を開発しました。

生化学やナノエレクトロニクス分野で扱う分子には、タンパク質やフラレン群といった1万～100万個という多数の原子からなるものが多く見られます。これまでの量子化学を用いてこれらの分子群を解析しようとする、膨大なコンピューターメモリーを消費し、長時間を要していました。そのため、原子量が多い分子の解析は非常に困難とされていました。例えば、分子システムのサイズを100倍大きくした場合、消費するコンピューターメモリーは100万～100兆倍かかることもありました。

今回、イレ教授らは、大きな分子をフラグメントに分割するフラグメント分子軌道法 (FMO) に密度汎関数強束縛分子法 (DFTB) を組み合わせた FMO-DFTB という新たなコンピューターシミュレーション法を開発しました。この FMO-DFTB 法によって、DNA、タンパク質といった大型分子や100万原子を超えるフラレン群の構造解析に成功しました。また、約2万個の原子を有する水分子群を FMO-DFTB 法を用いて解析したところ、DFTB 法のみではおよそ3週間かかると思われていた結果に対して、約3分間 (これまでの約1万倍の速度) で解析結果を得ることができました。

FMO-DFTB 法は、これまでスーパーコンピューターを必要とした巨大複雑系分子をデスクトップパソコンなどで高速、かつ精密に解析することができます。この新しい方法は、化学反応を始め、生体分子やナノエレクトロニクス材料の構造解析など、生物や化学をはじめとした様々な研究分野での応用が期待されます。本研究成果は、米国理論化学誌「ジャーナル・オブ・ケミカル・セオリー・アンド・コンピューテーション」のオンライン版で公開されました。

#### 【掲載雑誌、論文名、著者】

掲載雑誌: Journal of Chemical Theory and Computation

(ジャーナル・オブ・ケミカル・セオリー・アンド・コンピューテーション)

論文名: “Density-Functional Tight-Binding Combined with the Fragment Molecular Orbital Method”

(密度汎関数強束縛分子法 (DFTB) とフラグメント分子軌道法 (FMO) を組み合わせた新手法)

著者: Yoshio Nishimoto, Dmitri G. Fedorov, Stephan Irle (西本佳央、ドミトリ・フェドロフ、ステファン・イレ)

論文掲載日: 2014年9月22日

DOI: 10.1021/ct500489d

今回は記者会見を行いません。本研究成果についてのご質問がございましたら、下記までお問い合わせください。

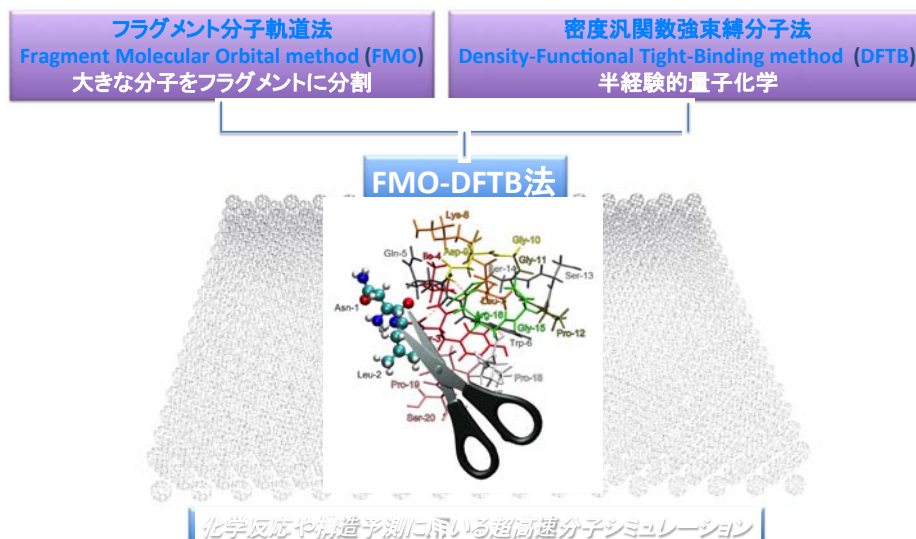


図1 FMOとDFTBを組み合わせた、超高速FMO-DFTB法。

\* FMO-DFTB法は、GAMESS-US (無料量子化学ソフトウェア)の次回更新で提供される予定です。

GAMESSホームページ: <http://www.msg.ameslab.gov/games/>

#### 【今回の研究のポイント】

- 1) 新しいFMO-DFTB法を用いることで、これまでスーパーコンピュータを必要としていた大型複雑系分子の解析を小型パソコンクラスターやデスクトップパソコンなどで超高速かつ精密に行うことができる。
- 2) 約2万個の原子を有する水分子群において、FMO-DFTB法を用いたところ、これまでの約1万倍の速度で解析結果を得ることができた。
- 3) FMO-DFTB法は、多くの原子からなるタンパク質やフラレン群など、生体分子や材料物質の解析に応用することが可能。