



文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」
次世代量子化学計算システム「ProteinDF」
—タンパク質のための擬カノニカル局在化軌道 (QCLO) 計算プログラム—
IT program of MEXT, "Frontier Simulation Software for Industrial Science"
Quantum-Chemical Simulation: The Next-Generation, "ProteinDF"
—Quasi-Canonical Localized Orbital in All-Electron SCF Calculation on Proteins—

東京大学生産技術研究所 ————— 計算科学技術連携研究センター

分類 量子化学計算

キーワード 分子軌道、局在化軌道、密度汎関数法

開発者 柏木 浩、佐藤文俊、西川宜孝、
村松伸哉、上野哲哉

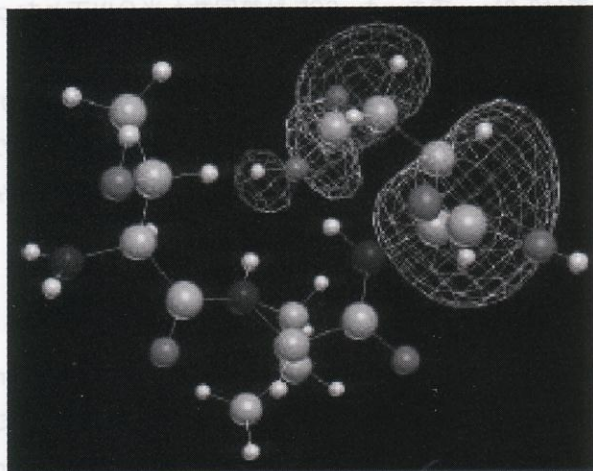
作成年月 2003年5月

コード名 ProteinDF—QCLO

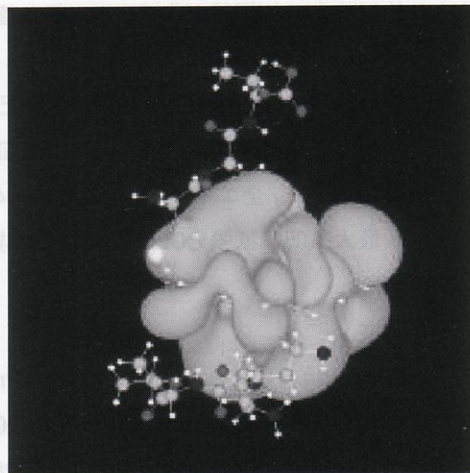
使用言語 C++

◇擬カノニカル局在化軌道 (QCLO) 計算

分子軌道計算は自己無撞着 (SCF) 法によって解を求めるので、その収束は初期値に大きく依存する。特にタンパク質のような巨大な系で計算を行うには十分に良い初期値から計算を出発させる必要がある。このため、擬カノニカル局在化軌道 (Quasi-Canonical Localized Orbital: QCLO) を用いて、精度の良いタンパク質波動関数を構築するプログラムを作成した。バイナリ、技術資料、および基本的な計算結果などの資料を公開する。



ペプチド鎖の QCLO の例



ヘム錯体の QCLO 例 (主成分は鉄の d_{xz} 軌道)

◇連絡先: ProteinDF ユーザ会 (東大生研・計算科学技術連携研究センター事務局)
<registration@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp>、Tel: 03-5452-6661、Fax: 03-5452-6662

◇コードの概要

タンパク質全電子計算収束過程¹⁻³⁾: タンパク質を構成するアミノ酸の計算から始め、ペプチド鎖を次第に大きくしながら計算を進める方法。この方法のベースとして新たに QCLO を導入した。

QCLO^{1,2)}: 1. 計算対象のタンパク質を小さなペプチドに分割し、適当な分子軌道法(ここでは Protein-DF^{3,4)}) で通常の分子軌道計算を実行する。2. ペプチド全体に広がった分子軌道を結合や孤立電子対に局在化するような LO に変換する。3. 側鎖やペプチド結合の部分など(フラグメント)の LO を選び出し、ペプチドの Kohn-Sham 行列を変換し、この固有値方程式を解く。4. 全てのフラグメントから集めた軌道の規格直交化を行う。こうして得られた軌道が QCLO である。QCLO はフラグメントに局在化しているが、カノニカル分子軌道の性質を持ちフラグメント全体に広がっている。

拡張 QCLO¹⁾: タンパク質全電子計算収束過程の各段階を Step と呼ぶ。前の Step で計算した QCLO をベースに次の Step の QCLO を求めるために、前の Step で求めた QCLO を変換行列として使い、固有値方程式をフラグメントごとに解く操作を分子軌道法の SCF 計算内部で行う。これにより、タンパク質全電子計算の大幅な時間短縮が達成される。

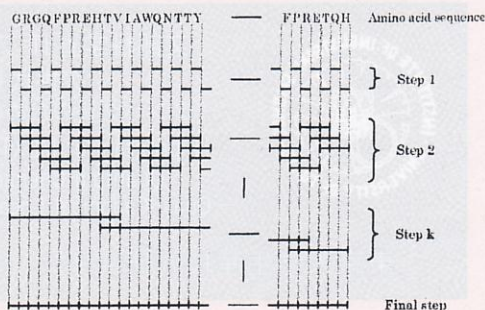
◇計算例

7 残基ペプチド鎖: His-Thr-Val-Glu-Lys-Gly-Gly のペプチド鎖に、同じタンパク質全電子計算収束過程を用いて、従来法(近似密度合成法)³⁾と QCLO 法の両方で初期値を作成した。その結果、QCLO 法は従来法より約20倍よい初期値が作成され、収束値との差は0.01a.u.であった。SCF 計算回数も半分以下となった。

ヘム錯体: 鉄ポルフィンと上下に第5・6配位子を含む各3残基ペプチド鎖 Cys-His-Thr、Lys-Met-Ile が配位したヘム錯体モデルの計算を行った。正しいカノニカル分子軌道と3フラグメント拡張 QCLO との比較をおこなった。全エネルギーの差は0.046a.u.、Atomic Population の差はフラグメント境界部でのみ大きく、最大0.05、拡張 QCLO は同様に境界部を除きカノニカル分子軌道と一致した。

◇関連論文

1) Kashiwagi, H. et al.; "Convergence Process with Quasi-Canonical Localized Orbital in All-Electron SCF Calculation on Proteins", *Mol. Phys.* **101** (2003) 81-86. 2) 柏木ら: "オブジェクト指向プログラミングとヘムタンパク質の全電子計算", *JCP&E Journal*, **13** (2001) 153-160. 3) Sato, F. et al.; "Calculation of all-electron wavefunction of hemoprotein cytochrome c by density functional theory", *Chem. Phys. Lett.* **341** (2001) 645-651. 4) Sato, F. et al.; "Development of a new density functional program for all-electron calculation of proteins", *Int. J. Quant. Chem.* **63** (1997) 245-256.



収束過程の概念: 1 残基の計算結果から 3 残基の初期値を作り、3 残基の計算結果から数残基の初期値を作る。これを繰り返す。