

第422回基礎科学セミナー

日時：12月1日(水)15:00 ~ 16:30

講演者: Domitri Fedrov

(産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門)

演題: Development of the quantum-mechanical method suitable for systems with 20000 atoms

場所: 先端基礎研究交流棟1階
第1センター会議室

講演者は、巨大系の量子化学計算を実現するフラグメント分子軌道法(FMO法)[1]の開発を行っている。FMO法では、初めに分子系をフラグメントに分割し、次に全系の静電場中に於ける各フラグメントとフラグメント二量体の量子化学計算を行う。それにより得られるフラグメント多量体物性(例:一及び二量体のエネルギー E_I , E_{IJ})から全系の値(E)を算出する。

$$E = \sum_{I=1}^N E_I + \sum_{I>J}^N (E_{IJ} - E_I - E_J)$$

このようなFMO法を用いることにより量子化学計算の著しい高速化が可能となる。同法は、これまでにRHF, DFT, MP2, CC等に対応し、GAMESSプログラムに組み込み無償公開している。計算の入力作成及び結果出力には無償公開されているFacioのGUIを使用できる。

(http://www1.bbq.jp/zzzfelis/Facio_Jp.html)

FMO法では、エネルギー勾配を用いた系の構造最適化が可能であり、基底状態のみならず、CASSCF, CIやTDDFTによる励起状態の計算を行うこともできる。最近では、FMO法を用いた動力学法(FMO-MD)も開発され、主に溶媒中の化学反応の解析に活用されている。また、上式の($E_{IJ} - E_I - E_J$)は分子内や分子間の相互作用を表し、分子認識等に重要な情報を提供する。

FMO法は、当初、分子集合体と蛋白質系に応用されたが、暫く核酸にも用いられた。2008年以降には、分子結晶や多糖、内部空孔を持つ沸石、及び、繊維状珪素分子[2]の無機系にも適用出来る様になった。特に製薬への有用性が期待され、多数の蛋白質と基質の錯体に適用されている。講演者は、実際に、2万原子を超える系(光合成やインフルエンザウイルスの錯体)の基底・励起状態について計算を行っている。講演では、FMO法の概要や講演者等による最近の進展について紹介する。

1. D. G. Fedorov, K. Kitaura, J. Phys. Chem. A 111 (2007) 6904-6914 (Feature Article).

2. D. G. Fedorov, P. V. Avramov, J. H. Jensen, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 477 (2009) 169-175.

<問い合わせ先>

先端基礎研究センター 分子スピントロニクス研究Gr
Pavel Avramov, 境 誠司(81-3802)