

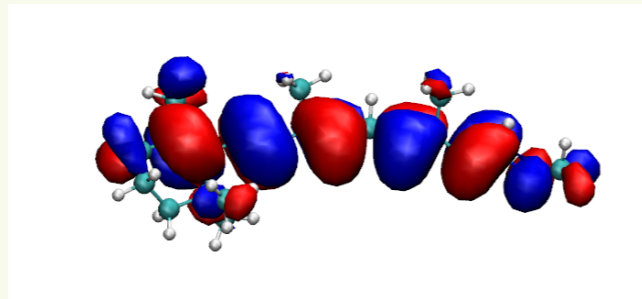


Background

主要な3つの分子モデル

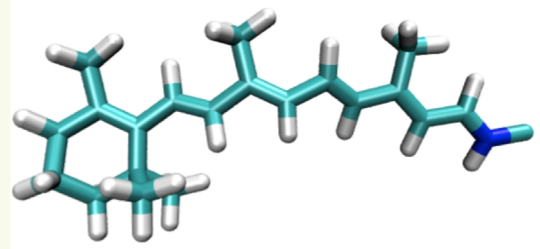
① 量子力学モデル【Quantum mechanics (QM)】

- 電子状態を露に考慮
- 高精度・高汎用性
- 高コスト



② 分子力学モデル【Molecular Mechanics (MM)】

- 経験的なポテンシャルを採用
- 低精度・低汎用性
- 低計算コスト【巨大系が可】



③ QM/MM モデル

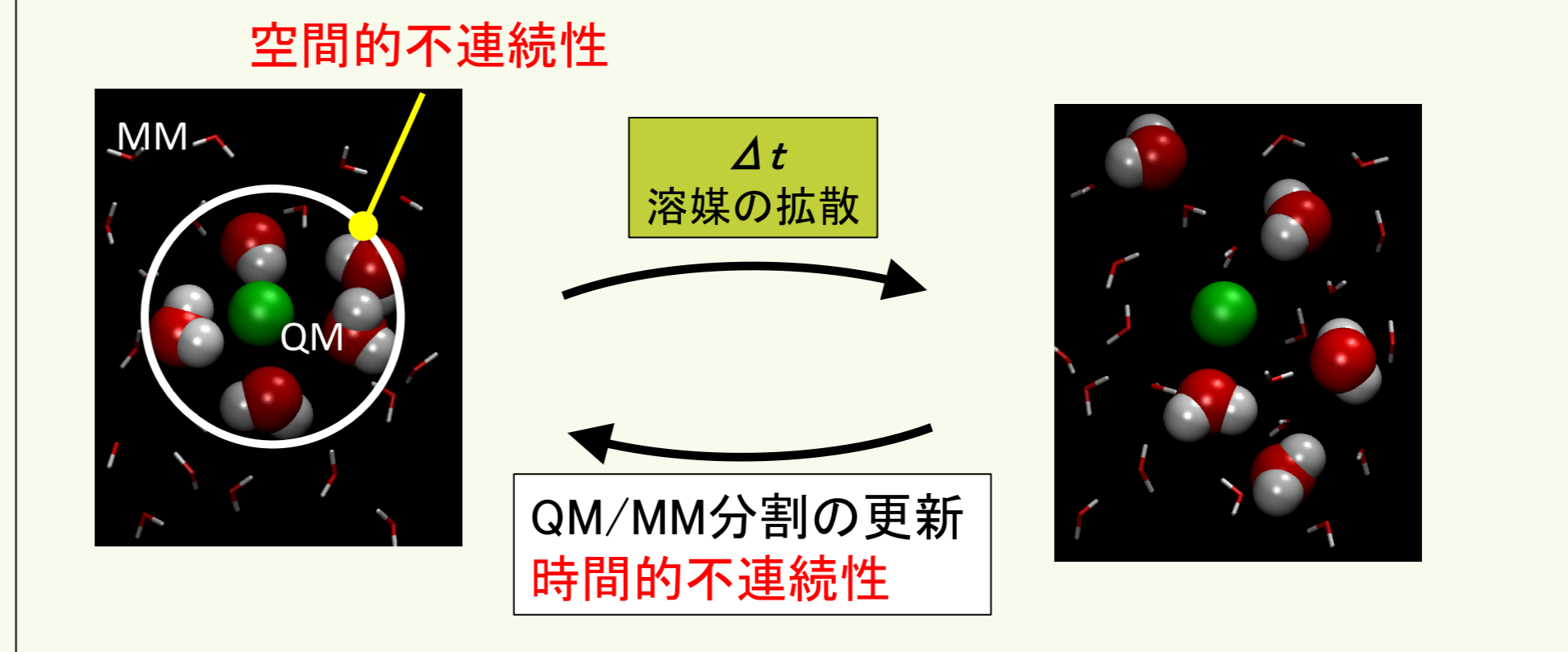
- QMとMMの混合モデル QM & MM
- 興味の対象を部分的にQMで精度良くモデル
- 周辺環境を粗くMMでモデル

溶液やタンパク質など巨大系での電子状態計算が可能に！

ただし時間発展(分子動力学)の計算においては致命的な欠点

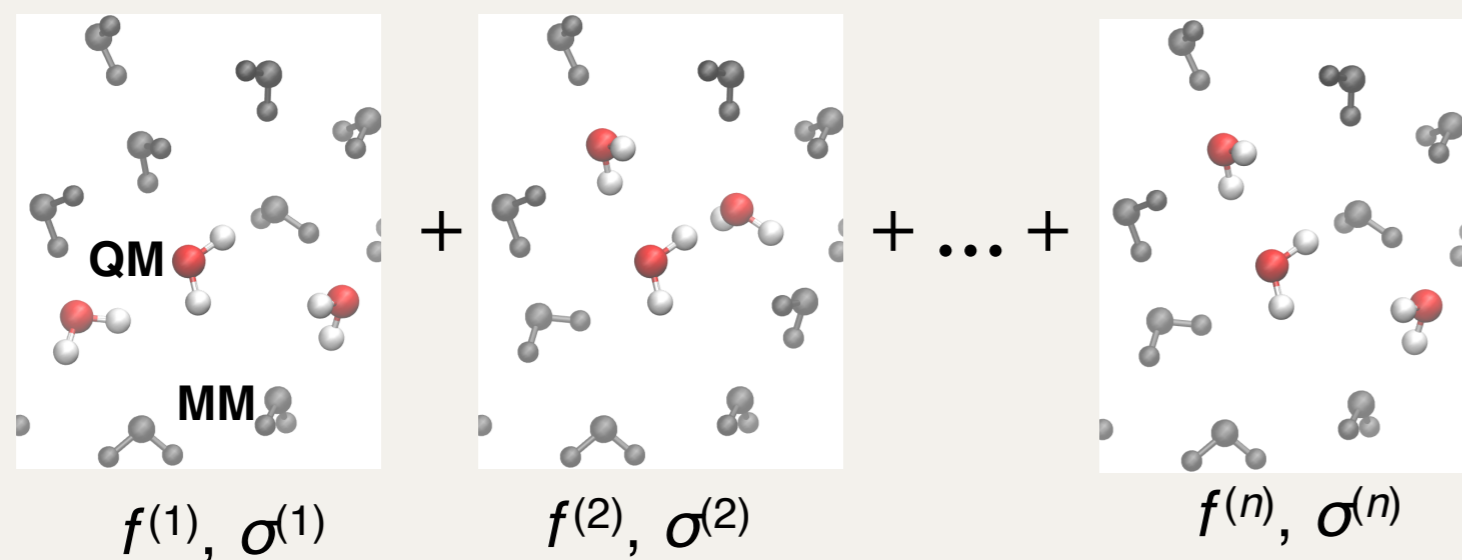
- QM と MM の境界にアーティファクト
- エネルギーや温度が保存しない

QM/MMにおける2つの不連続性



Size-Consistent Multipartitioning QM/MM (SCMP) method

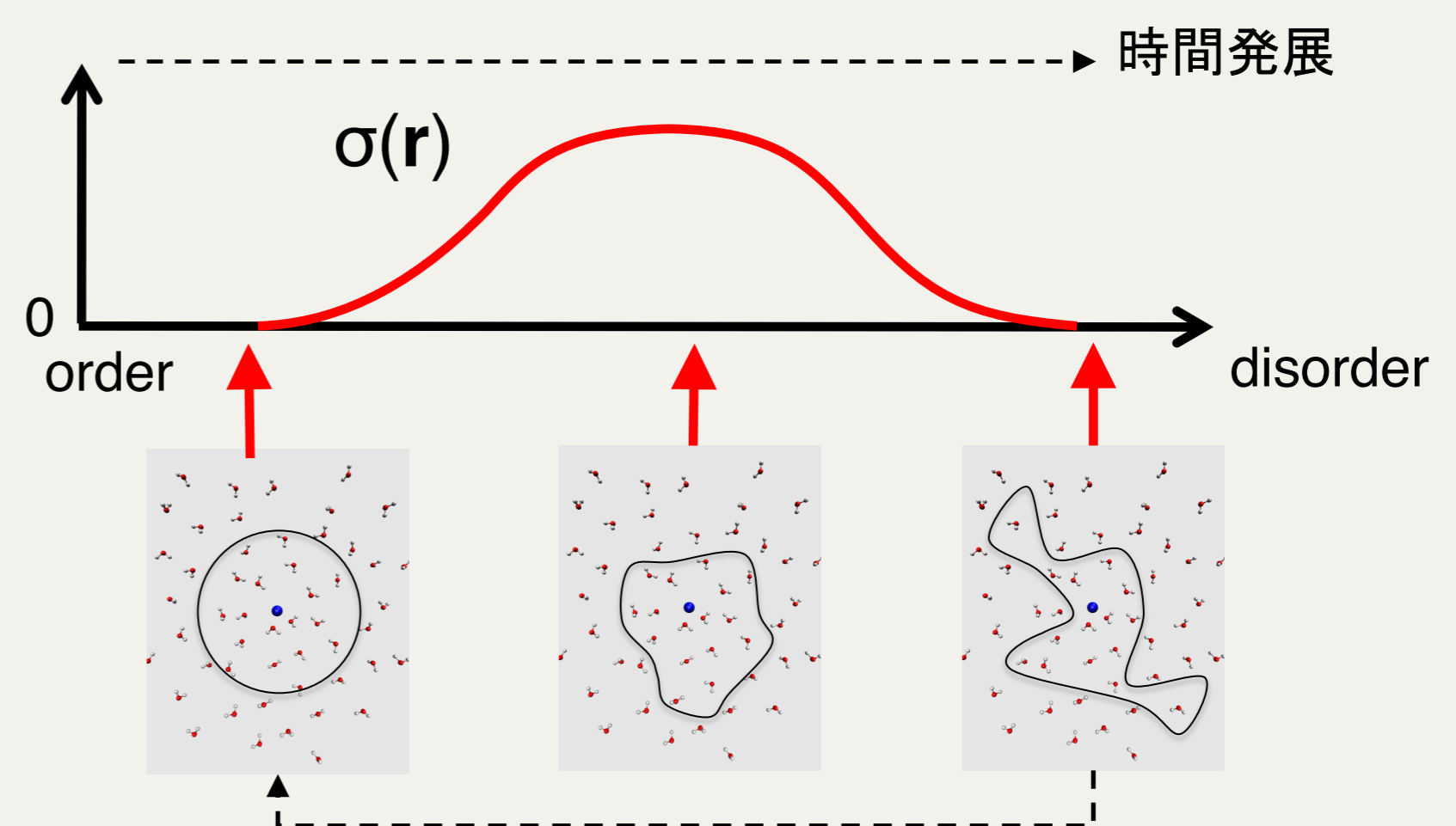
同数のQM溶媒分子をもつ各QM/MM分割に対して独立に力 F とポテンシャルエネルギー V を計算した後、重み $\sigma(r)$ を付けて足し合わせる



有効力 $F_j^{\text{eff}} = \sum_n \sigma^{(n)} f_j^{(n)}$

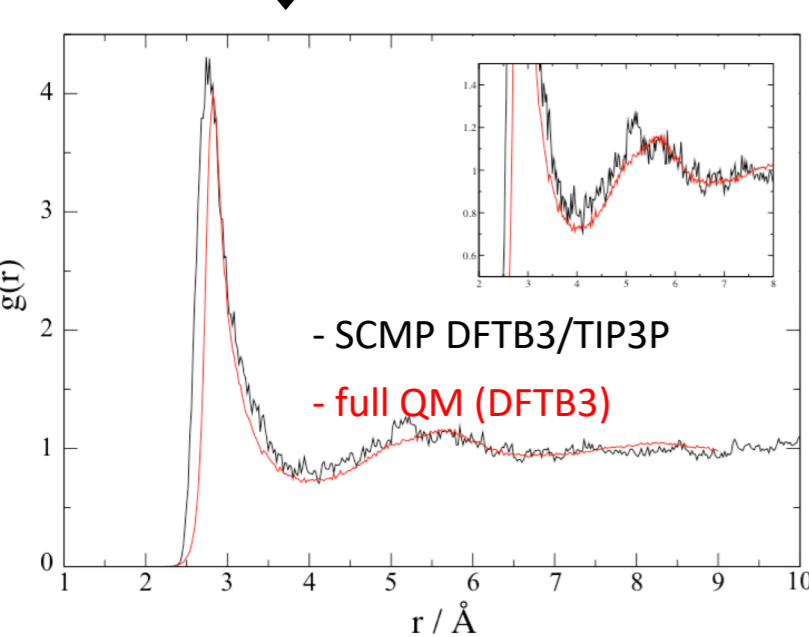
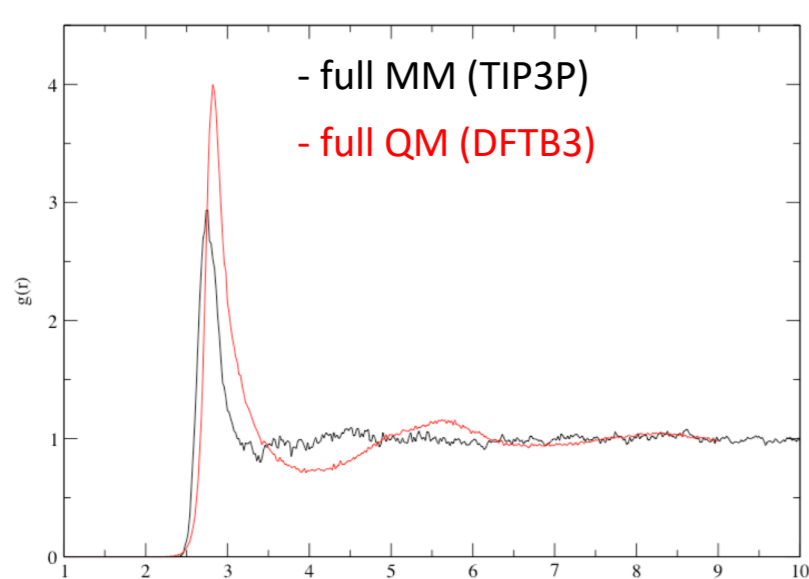
$$H = \sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \sum_n \sigma^{(n)} V^{(n)} - \int \frac{\partial \sigma^{(n)}}{\partial q} V^{(n)} dq$$

時間発展しQM領域が乱れた分割は整ったものに再定義する

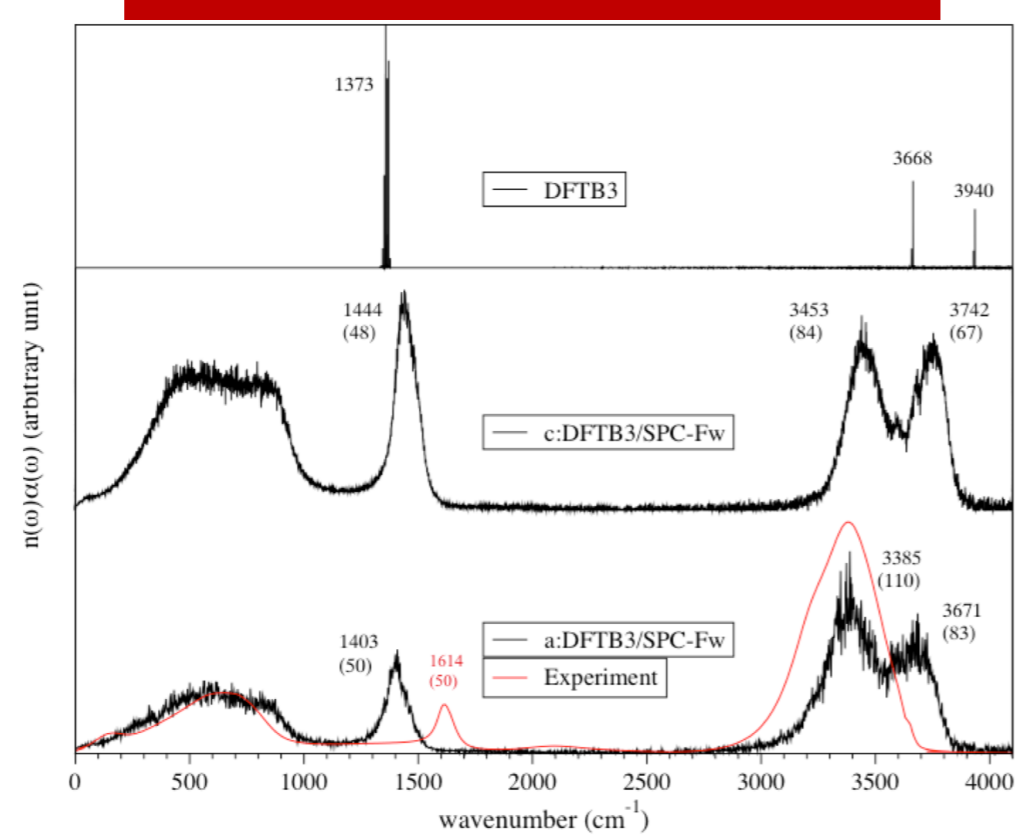


結果と展望

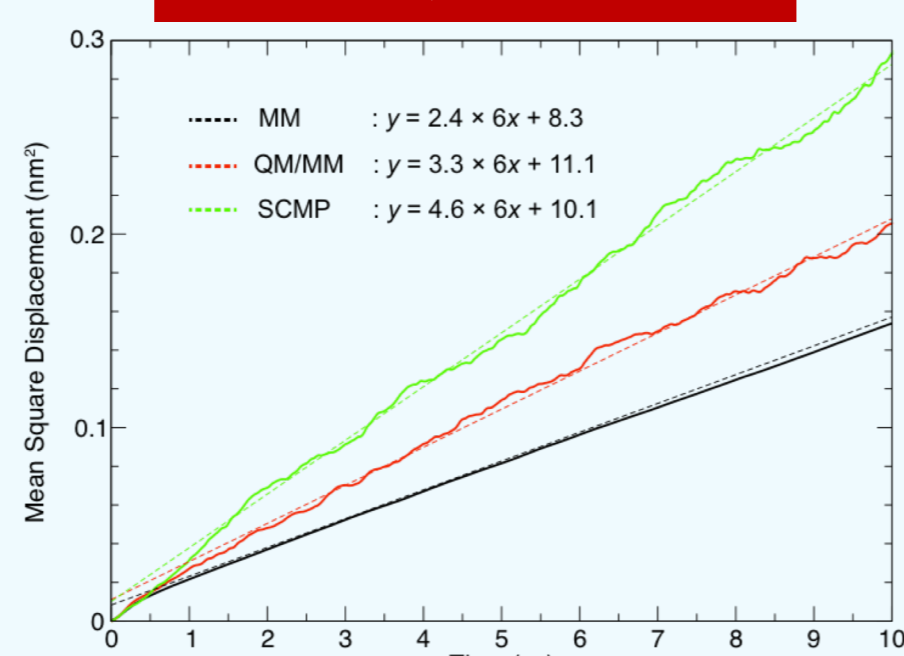
水和構造への応用



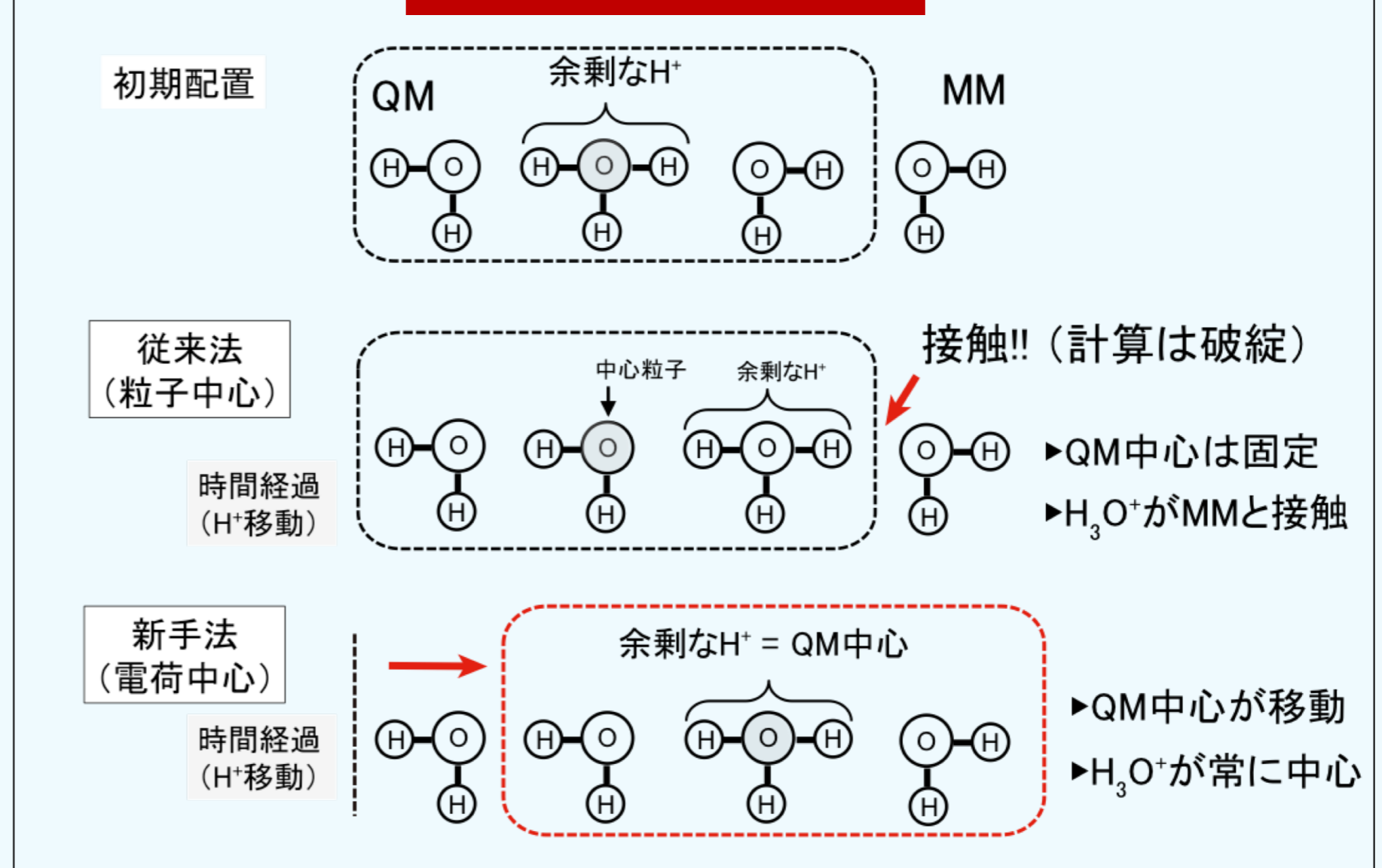
振動スペクトルへの応用



拡散係数への応用



水素イオンへの応用



文献

1. Kojima, Watanabe, Doi, Miyoshi, Kato, Ishikita, Sudo *submitting*
2. Watanabe, Kubillus, Kubar, Stach, Mizaikoff, Ishikita, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 17985-17997 (2017)
3. Watanabe, Yamashita, Ishikita, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **114**, 2916-2921 (2017)
4. Sakashita, Watanabe, Ikeda, Saito, Ishikita, *Biochemistry*, **56**, 3049-3057 (2017)
5. Sakashita, Watanabe, Ikeda, Ishikita, *Photosyn. res.*, **133**, 75-85 (2017)
6. Watanabe, Yamashita, Ishikita, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 201717048 (2017)