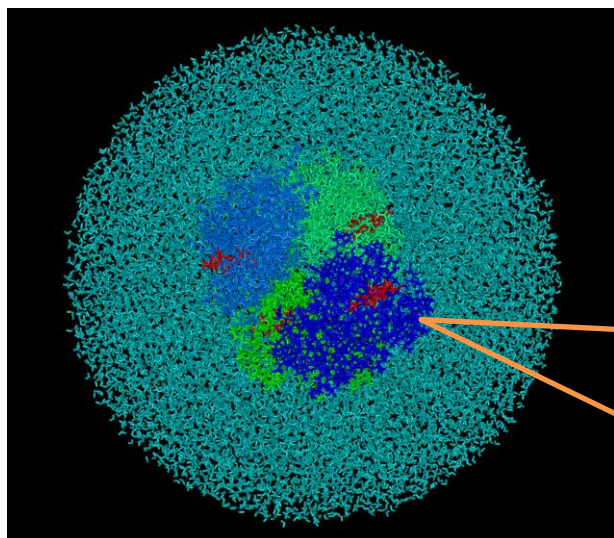


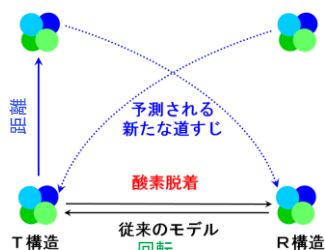
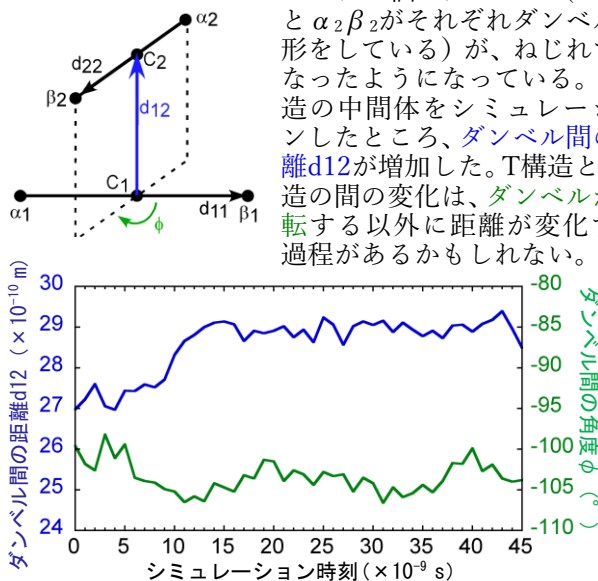


水中のヒトヘモグロビンA (HbA)のシミュレーション

HbAはアミノ酸 754個と ヘム 4個からなり、全原子数は 9,066個である。まわりに水分子 14,450個を配置してシミュレーションした(全部で原子の数は 52,416個) [3]。

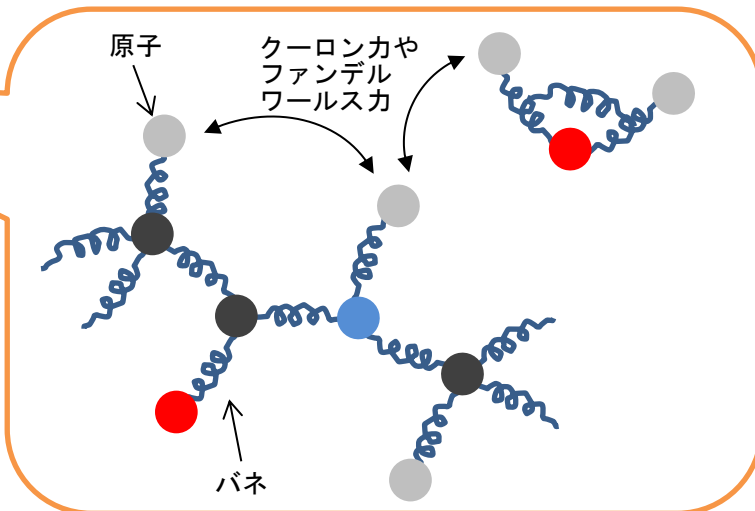
シミュレーションの予測

HbAは2個のダンベル ($\alpha_1\beta_1$ と $\alpha_2\beta_2$ がそれぞれダンベルの形をしている) が、ねじれて重なったようになっている。T構造の中間体をシミュレーションしたところ、**ダンベル間の距離d12**が増加した。T構造とR構造の間の変化は、**ダンベルが回転**する以外に距離が変化する過程があるかもしれない。



原子を質量と電荷をもった粒子として、ニュートンの運動方程式を解く[1]。基本はこれだけ！！

ただし、化学結合はバネのモデルで表し、ファンデルワールス力は $\epsilon \left\{ \left(\frac{R}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R}{r} \right)^6 \right\}$ の微分の形などで表す[2]。



このような事を先駆的に行ってきたカープラス(米国)は2013年にノーベル化学賞を受賞。ソフトウェアを開発している。

N個の原子があるとして、i番目の原子の運動は

$$\begin{cases} \vec{x}_i(t + \Delta t) \approx \vec{x}_i(t) + \vec{v}_i(t) \times \Delta t \\ \vec{v}_i(t + \Delta t) \approx \vec{v}_i(t) + \vec{a}_i(t) \times \Delta t \end{cases}, \quad \vec{a}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij} \quad (j \neq i)$$

からわかる。t = 0秒から始めて、t = Δt, 2Δt, 3Δt, ... と各時刻の原子の位置と速度を求める(分子動力学シミュレーションと呼ぶ)。

力($\vec{F}_{ij}$)の計算は約 N²個の組み合わせがあり、

- 効率的なアルゴリズム
- 並列分散処理

が必要である。

ぶちクイズ：ファンデルワールス力の式にあるεとRは何を表している？ なお、rは2個の原子間距離です。



- [1] 量子力学を用いて解く場合もある。
- [2] バネ定数やε, Rなどのパラメータは低ペプチドの電子状態の計算などから求める。温度制御、圧力制御も行われる。
- [3] M.Saito, I.Okazaki, J. Comp. Chem. **28**, p1129 (2007).