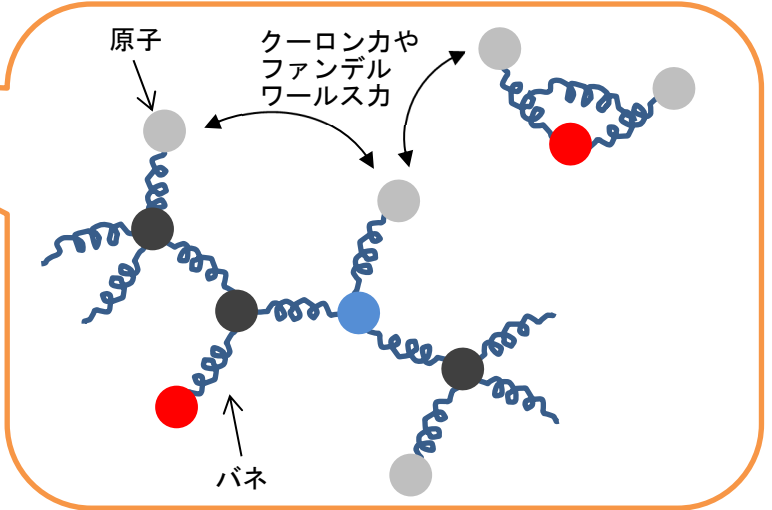


水中のヒトヘモグロビンA (HbA)について、O<sub>2</sub>結合のT構造をシミュレーションする[3]。HbAはアミノ酸 754個とヘム 4個からなり、まわりに水分子が 14,450個ある(全原子数 52,416個)。



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

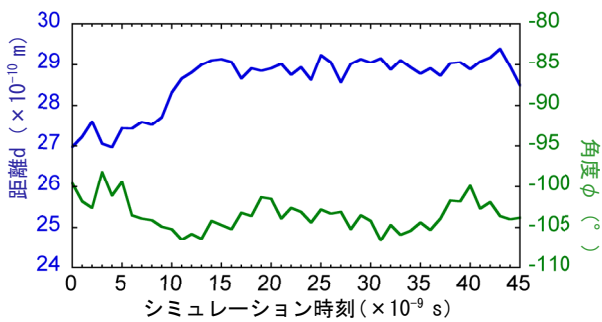
$$\begin{cases} \vec{x}_i(t + \Delta t) \approx \vec{x}_i(t) + \vec{v}_i(t) \times \Delta t \\ \vec{v}_i(t + \Delta t) \approx \vec{v}_i(t) + \vec{a}_i(t) \times \Delta t \end{cases}, \quad \vec{a}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij} \quad (j \neq i)$$

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 N<sup>2</sup>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： $\epsilon \left\{ \left( \frac{R}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{R}{r} \right)^6 \right\}$  はファンデルワールス力による位置エネルギーと呼んでいいものであり、r = Rで最小値をとっています。r = Rとr = 0, ∞のときの位置エネルギーはいくつ？ なお、ε, R > 0であり、rは2個の原子間距離です。



[1] 温度制御や圧力制御も行われる。量子力学を用いて解く場合もある。  
 [2] バネ定数や原子の部分電荷 $q_1, q_2$ や  $\epsilon$ と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。  
 [3] M.Saito, I.Okazaki, J. Comp. Chem. **28**, p1129 (2007).