

## 研究 成 果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |         |                                                                                                          |         |         |               |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|---------|---------------|
| 研究テーマ<br>(和文) AB                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |         | 生体分子の溶媒和の高精度解析に向けた新しい統計力学理論の開発                                                                           |         |         |               |
| 研究テーマ<br>(欧文) AZ                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |         | Development of a new statistical mechanical theory toward accurate analysis on solvation of biomolecules |         |         |               |
| 研究氏<br>代<br>表<br>名<br>者                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | カナ CC   | 姓)ヨシダ                                                                                                    | 名)ノリオ   | 研究期間 B  | 2012 ~ 2013 年 |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 漢字 CB   | 吉田                                                                                                       | 紀生      | 報告年度 YR | 2014 年        |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | ローマ字 CZ | YOSHIDA                                                                                                  | NORIO   | 研究機関名   | 九州大学          |
| 研究代表者 CD<br>所属機関・職名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |         | 九州大学大学院理学研究院・准教授                                                                                         |         |         |               |
| <p>概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。)</p> <p>液体の積分方程式理論は統計力学に基づき液体の構造を記述する理論である。近年、液体の積分方程式理論は RISM/3D-RISM を代表として、生体分子への応用が盛んに行われ、特に分子認識の解析において多くの成果を生み出している。液体の積分方程式理論を用いることで分子シミュレーションとは異なる角度からのアプローチが可能となることからその理論的・計算手法的発展が望まれている。</p> <p>このような背景の下、本研究では生体分子の溶媒和の高精度解析に向けた統計力学理論の開発を行った。主として、以下の3つのテーマに取り組んだ。</p> <p>1) MOZ 理論の複雑分子系への適用を志向した改良理論(拡張 MOZ 理論)の開発<br/>MOZ 理論は分子の配向を露わに取り扱うことのできる理論である。そのため、理論的には溶媒和構造の高精度な記述が可能であるが2体相関関数の記述に多重極展開を用いているため、大きな分子(生体分など)への応用は難しかった。そこで、本研究では 3D-RISM 理論の要素を取り入れ、3次元直交座標を用いることで従来は不可能であった複雑な分子への応用を可能にした。</p> <p>2) 生体分子の溶媒和理論である 3D-RISM 理論の超高並列アルゴリズム及びプログラムの開発<br/>3D-RISM の計算には3次元高速フーリエ変換が多用されるため、従来法では並列計算の際の並列数が3次元直交グリッドの1次元分に限定されるという欠点があった。本研究では、Volumetric 3次元高速フーリエ変換アルゴリズムを採用することでこの欠点を克服し、「京コンピュータ」を用いた10万コア越える並列計算を可能にした。</p> <p>3) 溶媒和した生体分子の電子状態を記述するための理論と効率的計算手法の開発<br/>本研究では生体分子の全電子状態計算手法であるフラグメント分子軌道法と 3D-RISM 理論の連成手法の変分的定式化を行った。また、高効率高精度な連成計算アルゴリズムを提案し、溶媒和下生体分子の全電子状態計算を可能とした。</p> <p>現在はこれらの成果を基にして、拡張 MOZ 理論の高速化、電子状態計算との連成手法の開発を行っており、その適用範囲を広げていく予定である。</p> |         |                                                                                                          |         |         |               |
| キーワード FA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 統計力学理論  | 溶媒和                                                                                                      | 積分方程式理論 | 分子認識    |               |

(以下は記入しないでください。)

|            |  |  |  |  |           |  |  |  |  |  |  |  |  |
|------------|--|--|--|--|-----------|--|--|--|--|--|--|--|--|
| 助成財団コード TA |  |  |  |  | 研究課題番号 AA |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 研究機関番号 AC  |  |  |  |  | シート番号     |  |  |  |  |  |  |  |  |

| 発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。） |                    |                                                                                                                                              |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|-----------------------------------|--------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|------------------------------------|---|---|---|--------------------|-----|--|
| 雑誌                                | 論文標題 <sup>GB</sup> | Extended molecular Ornstein-Zernike integral equation for fully anisotropic solute molecules: Formulation in a rectangular coordinate system |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | 著者名 <sup>GA</sup>  | Ryosuke Ishizuka, Norio Yoshida                                                                                                              | 雑誌名 <sup>GC</sup> | The Journal of Chemical Physics    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | ページ <sup>GF</sup>  | 084119～                                                                                                                                      | 発行年 <sup>GE</sup> | 2                                  | 0 | 1 | 3 | 巻号 <sup>GD</sup>   | 139 |  |
| 雑誌                                | 論文標題 <sup>GB</sup> | Massively Parallel Implementation of 3D-RISM Calculation with Volumetric 3D-FFT                                                              |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | 著者名 <sup>GA</sup>  | N. Yoshida 他5名(6名中2番目)                                                                                                                       | 雑誌名 <sup>GC</sup> | Journal of Computational Chemistry |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | ページ <sup>GF</sup>  | 1347～1355                                                                                                                                    | 発行年 <sup>GE</sup> | 2                                  | 0 | 1 | 4 | 巻号 <sup>GD</sup>   | 35  |  |
| 雑誌                                | 論文標題 <sup>GB</sup> | Efficient implementation of the three-dimensional reference interaction site model method in the fragment molecular orbital method           |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | 著者名 <sup>GA</sup>  | Norio Yoshida                                                                                                                                | 雑誌名 <sup>GC</sup> | The Journal of Chemical Physics    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | ページ <sup>GF</sup>  | 214118～                                                                                                                                      | 発行年 <sup>GE</sup> | 2                                  | 0 | 1 | 4 | 巻号 <sup>GD</sup>   | 140 |  |
| 図書                                | 著者名 <sup>HA</sup>  |                                                                                                                                              |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | 書名 <sup>HC</sup>   |                                                                                                                                              |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | 出版者 <sup>HB</sup>  |                                                                                                                                              | 発行年 <sup>HD</sup> |                                    |   |   |   | 総ページ <sup>HE</sup> |     |  |
| 図書                                | 著者名 <sup>HA</sup>  |                                                                                                                                              |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | 書名 <sup>HC</sup>   |                                                                                                                                              |                   |                                    |   |   |   |                    |     |  |
|                                   | 出版者 <sup>HB</sup>  |                                                                                                                                              | 発行年 <sup>HD</sup> |                                    |   |   |   | 総ページ <sup>HE</sup> |     |  |

#### 欧文概要<sup>EZ</sup>

Integral equation theory for molecular liquids serves as a powerful tool to investigate solvation structures, thermodynamic properties, and chemical processes of solvated biomolecules. In the present project, we have developed the theory, methods, and software implementation based on the integral equation theory, which are detailed as follows.

- 1) An extended formalism of molecular Ornstein-Zernike (XMOZ) theory has been proposed. The XMOZ theory can handle spatial distributions of solvent molecules around solute. We propose that the XMOZ theory can be applicable to a wide variety of chemical, physical, and biophysical problems in solution.
- 2) 3D-RISM software for the massively parallel machines with a volumetric 3D fast Fourier transform method has been developed. The software was proven to have excellent scalability regarding the parallelization on RIKEN's K computer.
- 3) An efficient implementation algorithm of 3D-RISM in the fragment molecular orbital (FMO) method has been proposed, which we call an FMO/3D-RISM method. The method allows us to investigate electronic structures of an entire macromolecule, such as a protein, as well as a solvation structure of a biomolecule.

Cooperating with these methods and software, molecular mechanisms of complex life phenomena driven by water can well be probed. Such studies are in progress in our research group.