



森田グループの海野悟君が第 9 回分子科学討論会優秀講演賞を受賞

高橋 英明 (東北大理・A01 計画研究連携研究者)

森田 明弘 (東北大理・A01 計画研究代表者)

「QM/MM 法における交換反発ポテンシャルの構築と QM/MM-ER 法への応用」

2015 年 9 月に東工大で行われた第 9 回分子科学討論会において、A01 班森田グループ (東北大院理) 修士課程 2 年の海野悟君が分子科学会優秀講演賞を受賞しました。発表の題目は“QM/MM 法における交換反発ポテンシャルの構築と QM/MM-ER 法への応用”です。本研究室で行ってきた QM/MM 法の方法論の開発に関して、海野君の研究が評価されたことは大変喜ばしいことと思います。

凝縮系の化学過程のシミュレーションにおいて、量子/古典ハイブリッドの QM/MM 法は極めて有効な手段として広く用いられてきました。QM 領域と MM 領域の間に分子間相互作用がある場合、通常の QM/MM 計算では QM-MM 間の交換反発ポテンシャルは Lennard-Jones ポテンシャルや Buckingham ポテンシャルのような古典力場で記述されます。このような力場は中性の安定分子の性質を再現するように決められるため、QM 分子が中性分子の場合は比較的うまく機能するのに対し、イオンや励起状態・遷移状態の分子ではうまくいかないことが知られています。このような問題を解決するため、本研究では QM 系の波動関数から非経験的に交換反発ポテンシャルを決定する方法を開発しました。

本研究では、QM 系の波動関数から分子外縁部において Becke-Roussel らの Slater 型の交換ホール関数を構築し、これを交換コア関数(ECF)として指数関数型の交換反発ポテンシャルのサイズパラメータを計算する新規な方法を開発しました[1]。この方法を $\text{H}_3\text{O}^+(\text{QM}) - \text{H}_2\text{O}(\text{MM})$ 系の水素結合ポテンシャル曲線の計算に適用したところ、系全体を MP2 法で計算した結果を従来の方法よりも良好に再現できることが分かりました (図 1)。これは、 $R_{\text{OO}} = 2.4 \text{ \AA}$ において、ECF によるサイズパラメータ σ が 3.335 \AA と計算され、古典力場の値($=3.522 \text{ \AA}$)よりも減少したことが要因であり、このことから本方法でカチオンにおいて波動関数が収縮する効果が記述できることも分かりました。さらに、凝縮

系へ拡張として、溶媒和自由エネルギーの計算法である QM/MM-ER 法に適用し、 H_3O^+ の水和自由エネルギーを計算しました。本方法で計算された値は -96.4 kcal/mol となり、実験値(-103.5 kcal/mol)と比較すると、従来法での結果 -79.2 kcal/mol を大きく改善することが分かり、凝縮系の計算においても本方法が有効であることが実証されました。

海野君の講演は良く練られた明快なもので、審査員にも本研究の特長を良くアピールできたと思います。QM/MM 法は現実的な計算コストで大規模分子を扱う優れた方法ですが、計算手法としては洗練される余地が大きく、今後の応用に向けた開発が期待されます。

参考文献

- [1] H. Takahashi, S. Umino, and A. Morita, “Construction of Exchange Repulsion in Terms of the Wave Functions at QM/MM Boundary Region,” *J. Chem. Phys.*, **143**, 084104 (2015).

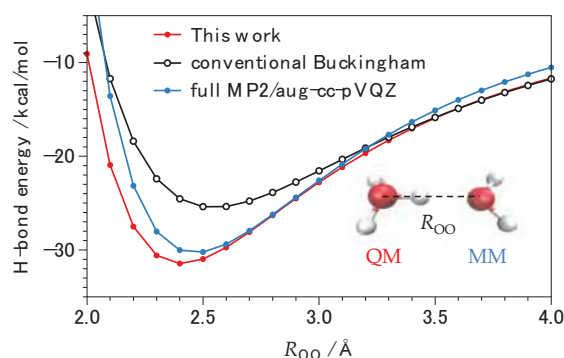


図 1 $\text{H}_3\text{O}^+ - \text{H}_2\text{O}$ 系の水素結合ポテンシャル曲線

