

adaptive QM/MM 法を用いた

バルクでのプロトン移動のダイナミクス解析

Analysis of Proton transfer dynamics in bulk phase using adaptive QM/MM method

渡邊 宙志
慶應義塾大学

1. 研究目的

プロトン移動は、我々に非常に馴染みが深く重要な現象であるにもかかわらず、分子シミュレーションでは最も取り扱いが難しい問題である。プロトンは水分子との共有結合の生成と消滅を繰り返されることにより輸送されるので、つまり量子力学(QM)モデルが必要となるがバルク溶液のような巨大な系に適用するには不向きである。一方、量子力学と分子力学(MM)的モデルを組み合わせた QM/MM 法は、QM 法と比べて計算コストを抑制することができるので、巨大な系を扱う上で有利である。しかしながら QM/MM 法で溶媒と溶質の両方の拡散が問題となり、プロトン輸送を取り扱うことができなかった。そこで本研究では、QM/MM 法を拡張しバルクでの水素イオンのシミュレーションを実現する。

2. 研究成果の内容

本研究では、動力学シミュレーションの最中に溶質と溶媒の両方の分子モデルが古典と量子の間での adaptive 法を開発した。これにより QM/MM 法をベースにして、溶液系における安定した水素イオンの分子動力学シミュレーションが可能になった。これにより、今まで解析が難しかったプロトン移動に関する物理量が低コストで定量的な算出可能になった。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

開発している手法は並列化を前提とした量子化学計算であり、同時に複数の CPU を占有する必要がある。また開発にともなうベンチマークテストを大量に同時実行する必要がある。個人でそのような計算リソースを所有することは困難である。従って本学際共同利用により、新しい手法を開発することができたと言える。

4. 今後の展望

今回開発した手法は、水素イオンを人為的にコントロールすることが可能である。これは拡張アンサンブル法などのサンプリング手法と親和性が高いことを表している。今後は様々な技術と組み合わせることで、シミュレーションの効率化を図ることで水素イオンに関連する様々な研究を加速する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- H. C. Watanabe, M. Yamada, and Yohichi Suzuki "Proton transfer in bulk water using the full adaptive QM/MM method: Integration of solute- and solvent-adaptive approaches", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, (2021) **23**, 8344-8386
- Y. Shikano, H. C. Watanabe, K. M. Nakanishi, Y. Ohnishi "Post-Hartree-Fock method in Quantum Computer", *European Physical Journal Special Topics*, (2021) 1-15
- H. Ishiwata, H. C. Watanabe, S. Hanashima, T. Iwasaki, M. Hatano, "Label-Free phase change detection of lipid bilayers using nanoscale diamond magnetometry", *Advanced Quantum Technology*, (2021) **4**, 2000106
- Q. Gao, G. O. Jones, M. Motta, M. Sugawara, H. C. Watanabe, T. Kobayashi, E. Watanabe, Y. Ohnishi, H. Nakamura, N. Yamamoto "Applications of Quantum Computing for Investigation of Electronic Transitions in Phenylsulfonyl-carbazole TADF Emitters" *npj computational materials*, **accepted**

(2) 学会発表

- [Hiroshi Watanabe](#) "量子コンピュータにおける変分量子固有値法の量子化学計算への応用"「自然と科学における階層と全体」(2021.1.8) オンライン
- [Hiroshi Watanabe](#) "溶媒の電子状態を取り込んだ分子動力学計算と生体分子への応用"量子生命科学会第二回大会(2020.12.24) オンライン

(3) その他

- 渡邊宙志"量子古典ハイブリッドモデルによる溶液系のダイナミクスシミュレーション: 溶媒量子効果の取り込みへの挑戦" *物理学会誌* (2021), **76**, 81-86

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	50000	0
Oakforest-PACS	○	255000	0

*配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。