

データ駆動型分子動力学シミュレーションの開発と宇宙生命への応用

Application of data-driven molecular dynamics simulation to astrobiology

堀 優太

筑波大学計算科学研究センター

1. 研究目的

近年の AI や機械学習の発展は目覚ましく、様々な分野の研究を加速させている。計算化学分野における機械学習の利用の一例として、機械学習ポテンシャル (MLP) が挙げられる。MLP は、第一原理計算で算出されたエネルギーと力の値をデータにして構築されたポテンシャル学習モデルであり、分子動力学 (MD) シミュレーションに必要な力場の情報を与える。MLP を用いることで、従来の第一原理 MD シミュレーションと同等の精度でより大きな空間・時間スケールのシミュレーションが実現できる。

宇宙空間では、地上では起こらない様々な化学反応・化学現象が生じており、例えば、アミノ酸を含む多様な有機分子は、星間塵を覆うアモルファス状態の水 (ASW) の表面で合成されると考えられている。アミノ酸は、タンパク質の構成要素であり、これらの分子の生成過程を理解することは、生命の起源を理解する上でも重要な知見を与える。しかしながら、実験的に生成過程の詳細を解明するのは困難であり、理論計算による解析が求められている。

本研究では、水などの凝縮系へと適用可能な MLP-MD シミュレーションの構築と、ASW 表面におけるアミノ酸およびその前駆体の吸着挙動について明らかにする。

2. 研究成果の内容

MLP-MD シミュレーションの構築に関して、MLP の弱点である学習データ不足によるシミュレーションの破綻を改善するため、学習データサンプリング手法を提案した。本手法では、MLP によるエネルギーと力の予測に失敗した構造を動径分布関数を指標として抽出し、その構造のエネルギーと力を量子化学計算で再計算して新たな学習データとして追加する。実際に、液体の水のシステムにおいて、学習データ数を抑えつつも、正しい物性値を再現できる MLP の構築が可能であることを確認した。

上記の手法を用いて、MP2 法の精度の MLP を構築し、MLP-MD シミュレーションを行うことで星間分子雲中の ASW 表面のモデリングを行った。このモデルにアミノ酸や電波望遠鏡観測で検出済みの有機分子が吸着した構造のサンプリングを行い、表面との相互作用を分析した。特に重要な発見として、アミノ酸は他の星間分子に比べ、表面と強く相互作用することがわかった。このことから、アミノ酸は仮に ASW 表面で合成されたとしても、気相への脱離は困難であると考えられ、また、電波望遠鏡による

観測は極めて難しいと推測される。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

本申請課題では、スーパーコンピュータを用いた大規模分子のシミュレーションを実行した。本計算により、実際に実験で取り扱うことができる空間スケールの計算を実行することができ、実験観測に向けた有用な事前情報を提供することができた。

4. 今後の展望

各研究課題において、多くの計算結果を得ることができたため、今後は、これらの計算結果をとりまとめて学術論文誌への投稿を行っていく。

5. 成果発表

(1) 学術論文

1. H. Sei, K. Oka, Y. Hori, Y. Shigeta, N. Tohnai, “Network Topology Diversification of Porous Organic Salts”, *Chem. Sci.*, 15, 8008-8018 (2024).
2. M. Inukai, H. Sato, K. Miyanishi, M. Negoro, A. Kagawa, Y. Hori, Y. Shigeta, T. Kurihara, K. Nakamura, “Cocrystalline Matrices for Hyperpolarization at Room Temperature Using Photoexcited Electrons”, *J. Am. Chem. Soc.*, 146(21), 14539–14545 (2024).
3. T. Ji, S. Su, S. Wu, Y. Hori, Y. Shigeta, Y. Huang, W. Zheng, W. Xu, X. Zhang, R. Kiyanagi, K. Munakata, T. Ohhara, T. Nakanishi, O. Sato, “Development of an FeII complex Exhibiting Intermolecular Proton Transfer Coupled Spin Transition”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 63, e202404843 (2024).
4. N. Watanabe, Y. Hori, H. Sugisawa, T. Ida, M. Shoji, Y. Shigeta, “A Machine Learning Potential Construction based on Radial Distribution Function Sampling”, *J. Comput. Chem.*, 45(32), 2949 (2024).
5. N. Watanabe, Y. Komatsu, K. Miyagawa, Y. Hori, Y. Shigeta, M. Shoji, “Enantioselective interactions of aminonitrile dimers”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 27, 340–345 (2025).
6. M. K. Si, Y. Hori, Y. Shigeta, “Evaluations of Highly Stable Derivatives of Polycyanated Tricyclic[10]annulene Anions as Efficient Halogen-Free Electrolyte for Lithium- and Sodium-Ion Batteries”, *ChemPhysChem.*, *in press*.

(2) 学会発表

(3) その他

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus	○	1152	+400	
Pegasus	○	720	-200	
Wisteria/BDEC-01				
※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。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				