

レプリカ置換分子動力学法の生体高分子への応用

分子科学研究所, 生命創成探求センター, 総合研究大学院大学

伊藤 暁

タンパク質の構造や機能を計算機シミュレーションにより調べるためには、タンパク質に対する効率的な構造空間の探索が不可欠である。そのための手法として、近年広くレプリカ交換法が用いられるようになってきた。レプリカ交換法ではレプリカが温度空間をランダムウォークすることにより、シミュレーションが自由エネルギー極小状態に捕らわれることなく効率的な構造空間のサンプリングを実現する。最近我々はより効率的な構造空間のサンプリングを実現する手法としてレプリカ置換法を開発した[1]。

通常のレプリカ交換法ではレプリカ間の温度交換にメトロポリス法を用いるが、レプリカ置換法ではレプリカ間の温度置換に諏訪・藤堂法を用いる。諏訪・藤堂法はメトロポリス法とは異なり詳細釣り合いの条件を満足せずに状態遷移を行うモンテカルロ法であり、状態遷移のリジェクト率を最小化することができる。この方法をレプリカ置換に用いることで、従来のレプリカ交換法と比較してレプリカの温度空間の効率的サンプリングを実現することが可能となった。

このレプリカ置換法を発展させて、温度ではなく特定の自由度にのみ関連したパラメータをレプリカ間で置換するハミルトニアンレプリカ置換法を開発を行った[2]。この手法により、レプリカ置換法と比較して少ないレプリカで効率的な構造空間のサンプリングを実現することが可能となった。

本講演では、レプリカ置換法及びハミルトニアンレプリカ置換法を紹介する。また、ハミルトニアンレプリカ置換法によりアミロイド β ペプチドのオリゴマー形成機構を調べた結果[3, 4]についても紹介する。

参考文献

- [1] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 570 (2013).
- [2] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Comput. Chem.* **34**, 2493 (2013).
- [2] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Phys. Chem. B* **118**, 11428 (2014).
- [3] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Phys. Chem. B* **120**, 6555 (2016).