

講義日:11月22日(水) QM/MM法を用いたタンパク質の機能解析

講師:広島市立大学大学院 情報学研究科 医用情報科学専攻 教授 鷹野 優

質問事項	回答
<p>真空中と溶媒中で計算結果が変わるとのことで、溶媒効果を考慮した方がよいとのことでしたが、タンパク質を含む巨大分子系の計算でも考慮できるのでしょうか。理想は、溶媒効果を考慮した方がよいと思うのですが、計算コストや講義中に先生がお話しされていたようなiterationの問題等がある現実的には難しいので、とりあえずは真空中で計算するしかないのではないかと考えております。</p> <p>もしも、タンパク質の系でも溶媒効果を考慮できるといった場合、どの方法がお勧めでしょうか。可能であれば、私がGaussianを使用しておりますので、Gaussianで行うことのできる方法を教えていただけませんか。</p> <p>パッと見た感じでは、I-PCM,IEFPCMなど複数のPCM法があり、RISM法はありませんでした。また、もしもPCMを使うのであれば、どれがよいのでしょうか。</p>	<p>質問ありがとうございます。</p> <p>はじめの真空中で計算することに関してですが、なんでもかんでも溶媒効果をいれるべきというわけではなく、どのような系を取り扱うのか、どのようなことを知りたいのかが重要になります。</p> <p>例えば、非常に大きなタンパク質の内部にQM領域がある状況で(溶媒分子がQM領域から遠くに離れている状況で)、</p> <p>QM領域の電子状態計算や構造最適化を行うときには、溶媒効果は小さいと思います。</p> <p>この場合は真空中で計算しても大きな違いはないと思います。</p> <p>ただ、溶媒がQM領域のすぐ近くにある場合は溶媒効果を考慮する方が無難かと思います。</p> <p>またタンパク質を含む巨大系の計算でも溶媒効果を考慮するのは可能です。</p> <p>GaussianではONIOMとPCMを組み合わせることができます。</p> <p>IEFPCMがGaussianではデフォルトのPCMです。これを使っただけでもいいかと思います。</p> <p>お役に立てば幸いです。</p>