

分子系の線形応答関数解析

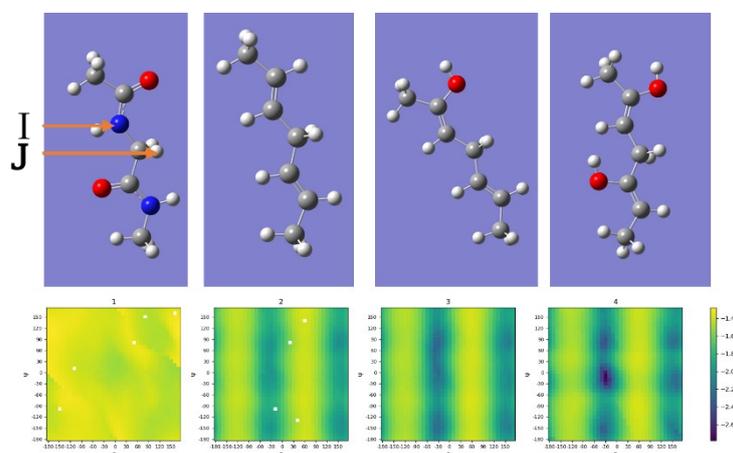
(阪大院理¹) ○尾池 蓮¹・橘川 武知¹・丸山 智大¹・川上 貴資¹・山中 秀介¹・奥村 光隆¹

Linear response function analysis of molecular systems (¹Graduate School of Science, Osaka University) ○Ren Oike¹, Takechika Kikkawa¹, Maruyama Tomohiro¹, Takasi Kawakami¹, Shusuke Yamanaka¹, Mitsutaka Okumura¹

The linear response function of a molecular system is defined as the density fluctuation of the J th atom due to a virtual perturbation to the I th atom in the molecule and can be treated as a descriptor of the reaction. In this study, we investigated the relationship between LRF and result suggests that it is possible to define the "chemical distance in polypeptide systems" as a new index for the calculation and design of protein systems.

Keywords : polypeptide, linear response function

分子系の線形応答関数は分子中の I 番目の原子への仮想摂動による J 番目の原子の密度揺らぎとして定義され、反応の記述子として扱うことができる。本研究では、ポリペプチド系との LRF と分子構造の関係を調べ、LRF の値が水素結合効果と超共役効果を介して $C\alpha$ 原子間の二面角に対して定量的に依存することを見出した。具体的にはポリペプチド系と、超共役構造を持つ類似の分子について LRF を調べた。結果、LRF に超共役が与える効果が見られたと同時に、選択する原子 I, J の原子種の組み合わせに対する依存性も明らかになった。この結果は、タンパク質系の計算や設計のための新たな指標となる「ポリペプチド系における化学距離」の定義が可能であることを示唆している。



[1] E. Prodan and W. Kohn, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 102, 11635 (2005).

[2] S. Yamanaka et al., AIP Conf. Proc. 1504, 916 (2012); K. Ueda, et al. Int. J. Quantum Chem. 113, 336 (2013); Y. Mitsuta, et al., Molecules 19, 13358 (2014); Y. Mitsuta et al., J. Phys. Soc. Conf. Proc. 5, 01105 (2015); Y. Mitsuta, et al. Mol. Phys. 114, 380 (2015); 満田他, アンサンブル 18, (2016); C. Kitagawa, et al. Molecules 24, 821(2019).