

n-ペプチド・アルコール・カルボン酸のエネルギー準位統計

Energy level statistics of n-peptides, alcohols, and carboxylic acids

○生島大樹¹, 山中雅則²

*Daiki Shojima¹, Masanori yamanaka²

Abstract: Energy level statistics of n-peptides, alcohols, and carboxylic acids are analyzed to characterize quantum mechanical properties. After molecular dynamics sampling, we calculated the electronic structure of them by the density functional method. Alcohols and carboxylic acids showed the critical level statistics for energy levels above LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Most of the n-peptides showed the critical level statistics. Some long peptides showed the Poisson statistics for energy levels below the HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital).

1. 導入

ダーウィンは生命の種の進化を、形質から考察した。これに対し、DNA における塩基配列の変異確率から生体高分子の進化プロセスを追跡する方法が、分子進化論である。分子進化の1つ下の階層として、分子の電子状態などの量子力学的な性質が分子進化を司るという仮説を進化の量子論と呼ぶ。

進化の量子論における先行研究の一つに、Vattay らによるものを挙げるができる[1]。彼らは20種類のアミノ酸と数十種類の蛋白質の分子軌道と波動関数を拡張ヒュッケル近似を用いて数値的に計算し、エネルギーについては準位統計を解析し、波動関数については多重フラクタル解析を行った。最近接エネルギー準位統計はポアソン統計、ガウス型直交集団、臨界統計の三種類に分類された。この結果に基づいて以下の推測を行った。蛋白質の電子状態は蛋白質の分子進化の過程で臨界統計を示す性質が必須であり、この微調整されていること。また、臨界統計以外の統計性は電子状態の進化論の意味での分化によって生じた性質であることなどである。エネルギー準位統計の普遍類はガウス型直交集団(GOE), ガウス型ユニタリー集団(GUE), ガウス型シンプレクティック集団(GSE)などがある。彼らは蛋白質は臨界準位統計

$$P_c(s) = As \exp(-Bs^{1+\nu}) \quad (1)$$

ポアソン統計,

$$P_p(s) = \exp(-s) \quad (2)$$

ガウス型直交集団 (GOE) ,

$$P_{GOE}(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right) \quad (3)$$

のいずれかに分類できたとしている。式(1)におけるA, Bはνに依存する規格化定数である。

一方で、該当論文[1]では各分子につき1つの立体構造のみの解析であり、電子状態の計算には拡張ヒュッケル近似を用いているため結果の正確性に疑問が残る。本研究では Vattay らによる数値計算と分子進化のシナリオの評価を行うため、分子動力学 (MD) 法による立体構造の多数のサンプリングと、密度汎関数法を用いた量子化学的な電子状態の解析を行った。得られた分子軌道のエネルギー準位をエネルギー準位統計の方法を用いて解析した。

2. 解析手順

- i. n-ペプチド, アルコール, 脂肪酸の立体構造データを作成する。
- ii. iの構造を初期構造として MD法によりサンプリングを行う。MD トラジェクトリーから1ps 間隔の立体構造を原子座標として抽出する。
- iii. 個々の立体構造について Gaussian [2] を用いた密度汎関数法による電子状態の計算を行う。
- iv. 得られたエネルギー準位について多項式を用いたアンフォールディングを行い、平均準位間隔からの揺らぎを計算した。規格化した

1 : 日大理工・院 (前)・物理 2 : 日大理工・教員・物理

準位の揺らぎのヒストグラムは横軸がアンフォールド後のエネルギー準位の間隔、縦軸はエネルギー準位の間隔の出現頻度となる。

3. 結果

作成したヒストグラムのうち、4-Ala, 9-Ala, decaol について図示した。n-ペプチドの HOMO 以下のエネルギー準位は、ペプチド鎖の伸長に伴いポアソン統計に漸近した。LUMO 以上のエネルギー準位は Gly など大半が臨界統計を示した。一方で、3-Ala, 4-Ala においては臨界統計に近い分布関数となるが (Fig.2), ペプチド鎖の伸長に伴いポアソン統計に漸近する (Fig.3)。さらにペプチド鎖を伸ばすことで、ポアソン統計となる可能性も考えられる。

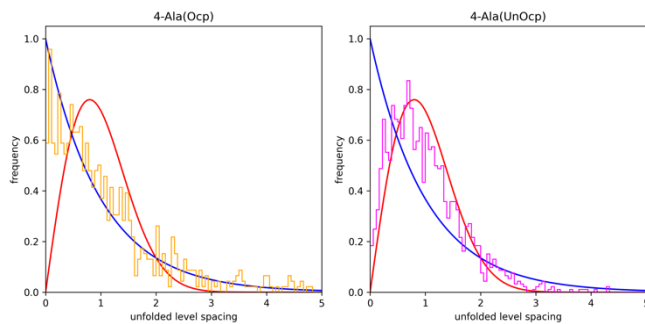


Fig.1 Histogram of nearest neighbour level spacing of 4-Ala. The left panel is for energy levels below HOMO. The right panel is one above LUMO.

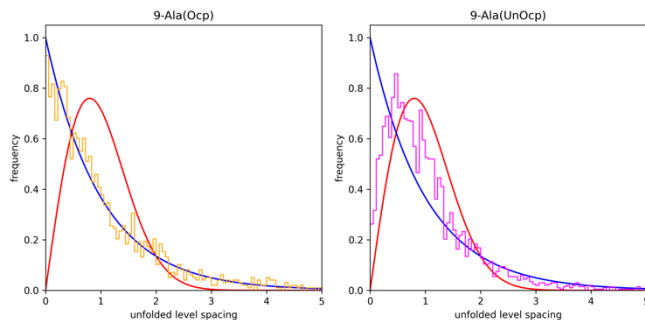


Fig.2 Histogram of nearest neighbour level spacing of 9-Ala. The left panel is for energy levels below HOMO. The right panel is one above LUMO.

アルコールとカルボン酸のエネルギー準位は、LUMO 以上では臨界統計を示した。HOMO 以下のエネルギー準位は、炭化水素鎖の伸長に伴い統計分布が分化する可能性がある (Fig.3)

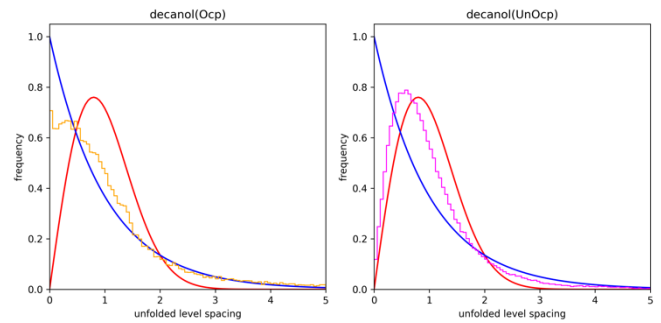


Fig.3 Histogram of nearest neighbour level spacing of decaol. The left panel is for energy levels below HOMO. The right panel is one above LUMO.

4. 参考文献

- [1] Gábor Vattay, Dennis Salahub, Istvan Csabai, Ali Nassimi and Stuart A Kaufmann: "Quantum criticality at the origin of life", *J. Phys.: Conf. Ser.* **626** 012023, 2015
- [2] Gaussian, <https://gaussian.com/man/>