

分子進化とアミノ酸のエネルギー準位統計

山中 雅則^{1,a)}

概要：セントラルドグマに基づかないペプチドの合成やセントラルドグマに基づいた蛋白質の分子進化について、アミノ酸のエネルギー準位統計の観点から初歩的な解析を行った。エネルギー準位統計は、物質の性質と量子力学的なエネルギーの統計性を関連付ける理論であり、固体物理においては多くの成果が報告されている。本研究においては、アミノ酸 20 種類について、非経験的第一原理的手法により分子軌道のエネルギーを、密度汎関数法により Kohn-Sham 軌道のエネルギーを求め、エネルギー準位統計を見積もった。統計精度を上げるために分子動力学法により原子配置のサンプリングを用いた上で計算を行った。計算結果とその意味について議論を行う。

¹ 日本大学理工学部物理学科
1-8 Kanda-Surugadai, Chiyoda, Tokyo 101-8308, Japan
^{a)} yamanaka.masanori@nihon-u.ac.jp