

課題名 (タイトル) :

機能性界面上における水滴の分子シミュレーション

利用者氏名 : ○古石 貴裕

所属 : 生命システム研究センター 生命モデリングコア 計算分子設計グループ

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

タンパク質は水中で疎水部分を会合させて、その形状を保っている。この会合は、水で満たされた系において、ナノメートルスケール以上の大きさを持つ疎水部分が近づいたとき、その間にある水分子は排除され、疎水部分間に引力が働くため生じる。この疎水部分間の会合は、生体内で物質輸送を行う分子モーターの動作原理に使用されていると考えられている。分子モーターはレールの役割を持つタンパク質に沿って、弱い結合と強い結合を繰り返しながら特定の方向に進む。この強い結合は疎水部間の会合によるものであり、会合のメカニズムが分子モーターの動作原理に密接に関わっていると考えられている。

そこで本研究では、水中に疎水原子からなる同じ大きさの板を近い距離で2つ配置し、重なった状態からそれぞれの板をずらした場合、板にどのような力が作用するかを、分子動力学(MD)シミュレーションを用いて調べた。

2. 具体的な利用内容、計算方法

MD シミュレーションは、原子間に働く力を仮定し、それによる相互作用計算から全ての原子に働く力を求め、原子を運動方程式に従って動かす手法である。188×188×47 Å³のセルに、53,456の水分子と、疎水原子を12×12で2次元格子上に配置した疎水板を2つ配置して、シミュレーションを行った。水分子はクーロン及びLennard-Jonse(LJ)相互作用を持ち、疎水原子はLJ相互作用のみを持つ。疎水板間の距離は7.5 Åとし、重なり距離を変化させた系を作り、疎水板を固定して、それらに働く力を求めた。シミュレーションは温度298 K、圧力0.1 MPaの温度圧力一定の条件で実行した。

3. 結果

シミュレーションにより、疎水板の間から水分子

が排除され、ナノバブルができたとき、疎水板は水分子から特定の方向に力を受けることが分かった。その力は疎水板間の距離とずれを小さくする方向に作用する。距離を小さくする方向に働く力は、ずれ量が大きくなるほど小さくなり、ずれを小さくする方向に働く力は、ずれ量に依存せずほぼ一定の大きさになることが分かった。

4. まとめ

水中に疎水性の原子からなる板を、平行で重なった状態からずらして配置した場合、そのずれを解消する方向に力が働くことが分かった。

5. 今後の計画・展望

今回のシミュレーションで得られた、疎水板に働く力は、分子モーターの動作原理と密接に関わっていると考えられるので、様々な条件での計算を行い、更に詳しい解析を行う予定である。