

## A2-04 分子シミュレーションで見る水圏機能材料

樋口祐次(東大物性研)

分子シミュレーションの魅力は、分子の構造変化や集合プロセスなどを可視化できることにある。分子スケールにおける現象の直観的な理解や詳細なメカニズム解明にも有効である。これまでに、水圏機能材料の設計指針の確立を目指して、分子シミュレーションを用いて構造・物性に関するメカニズム解明を進めてきた。多くの水圏機能材料は階層的な構造を持つことから、着目すべき現象とスケールを特定し、適切な計算手法を選択することが重要となる。水と材料の詳細な動態の解明には量子化学計算や全原子計算が有効であり、高島 (A03 班) のホストゲストゲルの結合状態や<sup>1)</sup>、菱田 (A02 班) とリン脂質膜上の水の動態<sup>2)</sup>を解明してきた。一方で、分子集合体のメゾスケールにおける構造や物性は粗視化計算が有効であり、結晶性高分子の機械的特性<sup>3)</sup>やリン脂質の相分離挙動<sup>4)</sup>を明らかにしてきた。本発表では、バイオ材料への応用が期待される、若林 (A01 公募) の両親媒性ペプチドの分子集合プロセスに関する粗視化計算の結果を紹介する。

両親媒性ペプチドは水中で繊維状構造を形成する。疎水部にアルキル基とフルオロアルキル基を導入した二種類の分子を用意すると、二種類の混合・分離が疎水部の長さ依存した温度応答性を示すことが実験から報告されている。詳細な集合プロセスを検討するために、図1に示すモデルを用いた粗視化計算を行った。図2に示すように、疎水部が短い場合には、球状ミセルを形成した後、二種類は分離した状態でひも状ミセルへと成長した。一方で、疎水部が長い場合には、球状ミセル形成後、図中の丸で示したように、二種類が混合したひも状ミセルへと成長した。その後、二種類が分離した集合構造へと緩和していく様子が観察された。実験においても、疎水部が長い分子のみ混合した状態が観察されており、同様のプロセスを再現できたと考えられる。疎水部が長い場合には疎水性相互作用が強く、二種類の分子の混合によるエネルギーの損を、集合構造を形成したエネルギーの得が上回ったことが原因だと考えられる。このように分子シミュレーションを用いると、実験では観察の難しい分子スケールのプロセスを詳細に見ることができ、材料設計への貢献が期待される。

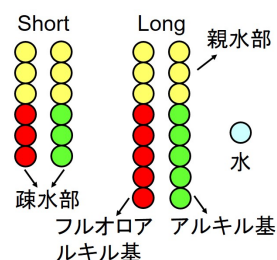


図1 両親媒性ペプチドの粗視化モデル。

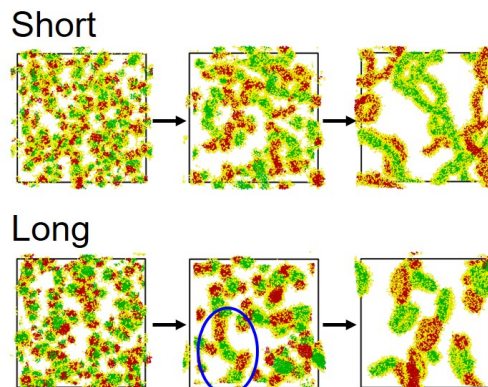


図2 両親媒性ペプチドの分子集合プロセス。水は非表示。

- 1) H. Tsuchiya, G. Sinawang, T.-A. Asoh, M. Osaki, Y. Ikemoto, Y. Higuchi, H. Yamaguchi, A. Harada, H. Uyama, and Y. Takashima, *Biomacromolecules* **21**, 3936 (2020).
- 2) Y. Higuchi, Y. Asano, T. Kuwahara, and M. Hishida, *Langmuir* **37**, 5329 (2021).
- 3) Y. Higuchi, *Phys. Rev. E* **103**, 042502 (2021).
- 4) J. Guo, H. Ito, Y. Higuchi, K. Bohinc, N. Shimokawa, and M. Takagi, *Langmuir*. in press.

### PROFILE

樋口祐次(東京大学・物性研究所)

2011年 京都大学 大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 博士後期課程修了 博士(理学)、2011年 東北大学 大学院工学研究科 助教、2013年 JST さきがけ研究員(兼任)、2015年 東北大学 金属材料研究所 助教、2017年より東京大学 物性研究所 助教、現在に至る。専門分野は、高分子物理学、分子シミュレーション。