

A2-05 シミュレーションで水圏機能材料における分子の動きを“見る”

渡辺豪(北里大理・KISTEC)

水圏で機能を発揮する有機材料は、水中や水界面においてバルクとは異なる特徴的な物性を有することが知られている。その主な要因である水分子と材料を構成する有機分子との相互作用をより深く理解するためには、最先端の計測手法とシミュレーションを駆使した研究の展開が期待される。

我々は全ての原子をあらわに取り扱い、そのダイナミクスを時々刻々と追跡する全原子分子動力学(MD)シミュレーションを用いて、様々な水圏機能材料における機能発現のメカニズムや水分子の動態について明らかにしており¹⁾³⁾、本講演ではその成果の一部について紹介する。

液晶界面は特異的な相互作用を検出するソフトマテリアルへの展開が多く提案されているが、特に水液晶界面では生体分子吸着などの生物学的現象を計測・検出する試みが精力的に行われている。生体分子認識部位が導入された両親媒性分子が水界面に形成する液晶薄膜において、特異的なタンパク質吸着が報告されているが、タンパク質吸着が生じている最表面、すなわち水液晶界面近傍での詳細なダイナミクスについては分かっていない。そこで我々は、生体分子認識能を持つ液晶分子で構成された水面上単分子膜を対象としたMDシミュレーションを行い、水中のタンパク質が吸着した際の膜構造変化や周囲の水分子のダイナミクスについて調べた。タンパク質と単分子膜の相互作用エネルギー、膜の配向構造などを解析した結果、単分子膜を構成する液晶分子に生体分子認識部位が導入されると、タンパク質の膜に対する吸着安定性(Fig. 1a)や膜構造変化(Fig. 1b)が有意に大きくなることが示された。さらには、生体分子認識部位を有する液晶分子の単分子膜にタンパク質が安定して吸着することで、膜界面の水分子の拡散挙動が抑制されていた。これらは、水界面に形成された液晶膜において、生体分子認識能と界面近傍の水分子の動態に相関関係があることを示唆している。

また、生体親和性高分子ブラシや分子接着能を持つメカノ機能材料についても、原子・分子スケールでの構造変化や水分子のダイナミクスに関して重要な知見を得ているので当日報告する。

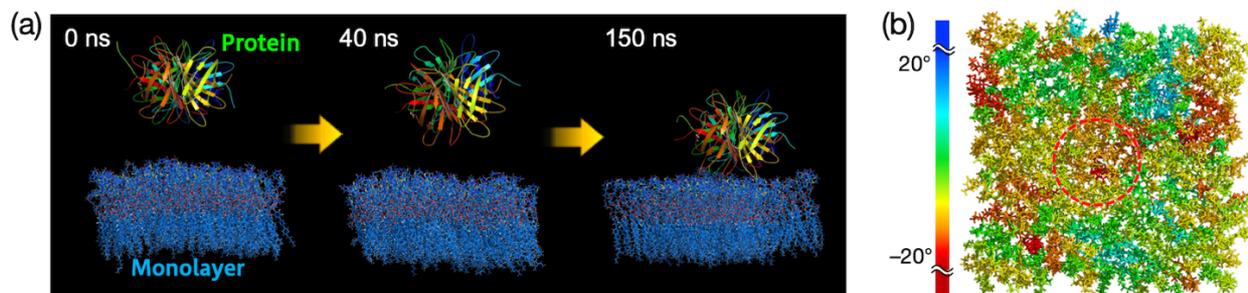


Figure 1. (a) Snapshots of MD simulation at 0 ns, 40 ns, and 150 ns. Water molecules are not shown for clarity. (b) Distribution map of the tilt angle differences of individual mesogenic molecules viewed from the top. The circles outlined by the red broken line are the region for the protein molecule.

1) A. Ishida, G. Watanabe, M. Oshikawa, I. Ajioka, and T. Muraoka, *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 13523.

2) G. Watanabe, H. Eimura, N. L. Abbott, and T. Kato, *Langmuir* **2020**, *36*, 12281.

3) C. Ueda, J. Park, M. Tanaka, G. Watanabe, Y. Takashima *et al.*, submitted.

PROFILE

渡辺豪(北里大学・理学部)

2011年早稲田大学先進理工学研究科博士課程修了。2009年早稲田大学先進理工学部助手、2012年北里大学理学部助教、2020年より北里大学理学部講師。また2021年より神奈川県産業技術総合研究所(KISTEC)の非常勤研究員を兼務。専門はソフトマター物理学、計算科学。主な受賞歴は、日本液晶学会奨励賞(2017年)、関博雄記念賞(2018年)、ChemComm Emerging Investigators (2020年)など。