

A1-04 計算科学による水圏機能材料の全原子シミュレーション

渡辺豪 (北里大未来工)

水存在下(水圏)で機能を発揮する有機材料は、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。主要な要因と考えられる、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分子シミュレーションを駆使した研究の展開が期待される。本研究では、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を解明することを目指してきた。

【分子集合体の生体分子吸着メカニズム解明】 水圏で特異的な生体分子吸着性を発現する有機分子集合体は、生物学的現象を計測・検出するソフトマテリアルへの応用が期待されているが、分子レベルでのダイナミクス、周囲に存在する水分子の動態の理解には計算科学的手法による解析が重要な役割を果たす¹⁾。

例えば、A01-1 加藤が設計した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について、水中のタンパク質吸着時の膜構造変化や界面の水分子のダイナミクスを MD シミュレーションにより調べた(図 1)²⁾。その結果、タンパク質が安定して吸着する単分子膜では、吸着前後での膜構造変化、そして膜界面における水分子の拡散挙動の抑制が有意に大きいことが明らかとなった。同様の傾向が、A01 芹澤が提案した逆平行配列した結晶性セルロース集合体においても確かめられた³⁾。また、アンブレラサンプリングを用いた自由エネルギー解析によって、分子集合体と生体分子の吸着性を定量的に評価可能であることも確認している。

【超分子材料の安定性評価】 ホスト-ゲスト結合やトポロジカルな制約に基づく超分子材料は、マクロな物性を実験で調べるのが一般的であるが、1 分子同士といった分子スケールでの分子間相互作用や安定性評価では MD シミュレーションが有効な場合がある。

A01 中村が開発した、リン酸モノエステルを選択的に結合するアミドシクロデキストリン誘導体について、そのアニオン認識の選択性には、シクロデキストリン内孔の疎水効果とアミド N-H プロトンによる水素結合の両方が寄与していることを裏付ける結果が MD シミュレーションで得られている(図 2)⁴⁾。前述の系以外にも、水中での有機色素分子とシクロデキストリンの包接錯体の構造安定性や溶液中の超分子メカノフォアにおける包接・解離状態の遷移ダイナミクスの理解に自由エネルギー解析が有用であることを示した。

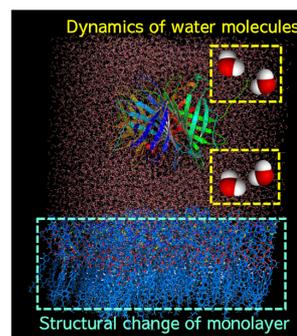


図 1. 生体分子吸着性を示す水面上単分子膜の MD シミュレーションのスナップショット

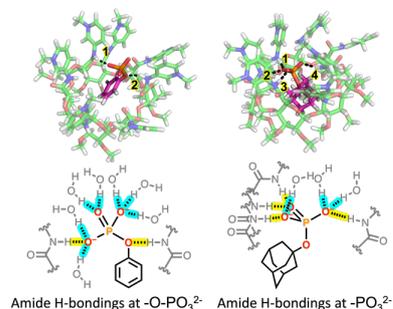


図 2. フェニルリン酸、アダマンチルリン酸とシクロデキストリンとの包接錯体における水素結合状態

- 1) T. Kato, J. Uchida, Y. Ishii, G. Watanabe, *Adv. Sci.* **2024**, *11*, 2306529.
- 2) G. Watanabe, H. Eimura, N. L. Abbott, T. Kato, *Langmuir* **2020**, *36*, 12281.
- 3) T. Serizawa, S. Yamaguchi, I. Kawamura, G. Watanabe, M. Tanaka, *et al. Colloids Surf. B* **2022**, *220*, 112898.
- 4) T. Nakamura, H. Takayanagi, M. Nakahata, Y. Ishii, G. Watanabe, *et al.* under review.

PROFILE

渡辺豪 (北里大学未来工学部 教授)

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 年同大学理学部講師、2022 年同大学理学部准教授を経て、2023 年より同大学未来工学部教授に就任し、現在に至る。専門はソフトマター物理学、計算科学で、液晶、有機半導体、超分子材料、生体関連分子に関する研究に従事。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)、文部科学大臣表彰若手科学者賞(2022 年)など。