

P4

散逸粒子動力学法によるベシクル形成シミュレーション

(豊田中研) 丸山 豊

1 緒言

ベシクルは、中心に水を取り囲む形で両親媒性分子の二分子膜が球状になった物質である。両親媒性分子は分子内に親水性の頭部と疎水性の飽和炭化水素鎖を持つ構造をしている。この分子が形成する二分子膜は生体膜などの基礎モデルとなる。ベシクルの含有分子数は極めて大きく、さらに周りの水分子を考慮すると通常の分子動力学法で計算するのは困難である。本研究では、メソ領域の解析手法である散逸粒子動力学法を用いて両親媒性分子のベシクル構造形成シミュレーションを行った。

2 方法

散逸粒子動力学法は粒子を原子分子の集合体として取り扱う手法である。両親媒性分子のモデルとして親水基を表す球1つと疎水基の球3つが数珠状に繋がった物を考えた。また水分子の集合体を球1つで表現した。それぞれの球の大きさは同一とした。水10688粒子の中に両親媒性分子400分子(1600粒子)をランダムに配置して初期状態とした。水と疎水基の反発係数が強い場合と弱い場合について調べた。

3 結果

反発係数が強い場合、ランダムに配置された両親媒性分子はまず球状ミセルを形成する。その球状ミセルがさらに結合して円盤状のミセルが出来上がり、さらに椀型に変化して水を包み込んでベシクルとなる。しかし反発係数が弱い場合には椀型の間状態を通らずに球状を形成していく。球状になった初期には二分子膜が水を取り囲んだ形となっていないが、時間の経過と共に二分子膜が整えられていく。

このように水と疎水基の反発係数の大小によりベシクルの形成過程が変化することがわかった。さらに形成過程の違いを調べるために水の最大クラスター数の時間変化を調べた。反発係数が大きい場合にはベシクルが形成された時点で一定量の水が二分子膜によって完全に取り囲まれ、その後内包された水の数には変化しない。しかし反発係数が弱い場合には断続的にピークが立ち、二分子膜に穴が開閉してベシクル内外の水が繋がることがわかった。またこの穴の開閉によってベシクルに内包される水の数も変化した。

連続体モデルでは発生しない穴の開閉のダイナミクスが観察され、同時に膜の水透過性が確認された。

参考文献

- [1] S. Yamamoto, Y. Maruyama and S. Hyodo, J. Chem. Phys., **116**, 5842 (2002).