

スパッタリングにおけるクラスター形成

岡山理科大学・理 後藤 正樹

金属固体表面に数keVのイオンビームを照射させると、金属原子がはじき出される現象、スパッタリングが起る。そこで、スパッタされたものの中には単原子ばかりでなく2原子分子、更に数10個からなるクラスターが形成することが報告されている。

このとき、少数粒子のクラスター形成 ($n=3, \dots, 6$) を評価するためにcollision cascade modelを採用した。ここで、collision cascade modelとは、金属固体表面に数keVのイオン入射すると、この入射イオンは固体内の原子と弾性散乱を起し、運動エネルギーを与える。そして、その原子は固体に束縛されているのだが、もし、もらい受けたエネルギーがその束縛エネルギーよりも大きければ、格子点からはじき出され、さらに同様に他の原子と衝突する。このような衝突連鎖モデルのことである。もし、表面近傍でこのcollision cascadeにより発生した反跳原子が表面結合エネルギーを乗り越えるだけの運動エネルギー（固体外向きの表面垂直成分）を持っていれば、真空中にはじき出される。このスパッタ原子の挙動をEmbedded-Atom-Methodポテンシャルを用いたMolecular Dynamicsシミュレーションで追跡するにあたり、まず手始めに結晶の平衡状態の物性値から決定されたそのEAMポテンシャルが少数粒子系に対して、どこまで通用するかを検討する。つまり、それぞれの少数粒子系のとるクラスターの構造、bond energy, bond lengthの値を検討する。

ProteinG-水系の変異体の分子動力学シミュレーション
molecular dynamics simulations of two mutants of ProteinG-water system

杉浦淳之介

東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻生命環境科学系

Jun'nosuke Sugiura

Department of Life Science, Graduate School of Arts and Sciences, University of Tokyo

蛋白質-水系の分子動力学シミュレーションをやっている。分子動力学シミュレーションには大変な計算時間がかかるから、蛋白質としては粒子数の少ないProteinGのB1ドメイン（840原子程度）を使う。この周りに半径25Åの球状にたくさんの水分子がとりまいているのが系である。統計は300Kの定温である。境界条件として水が半径25Åの球の外にでないようにしている。これを十分（400ps程度）平衡化した後サンプリングする。

ProteinGの2つの変異体を比較する。これらは互いに1つのアミノ酸（53番目の残基）が異なっている。1方はアスパラギンで、もう1方はアスパラギン酸である。これらの間の違いは荷電が1eだけアスパラギン酸の方が低くなっていることだ。だからこの比較は蛋白質-水系に電荷を導入したら系はどう変わるかを意味する。

今回はProteinGは固定して動かさないシミュレーションの結果を発表する。この結果は系に電荷を導入することに応じて水の状態がどう変化するかを示す。ProteinGの方も動かしてしまうと全体の応答しかみれない。水の状態変化だけを純粋に取り出してみたい場合はProteinGは止めておいた方がよい。

水の状態に着目し、水の構造・運動・静電ポテンシャルを調べる。アミノ酸置換によって水の状態がどう変化するかを調べることによってアミノ酸がその場所で果たしている役割みたいなものを考察することができよう。

今後の予定はProteinGも動かしたシミュレーションを行う。また、1方の平衡状態からもう1方の平衡状態へ移る動的過程を調べる。

私は平衡状態と非平衡状態の違いに興味がある。この一連の研究によってその理解が少しでも深まればいいと思う。例えば、シミュレーションしているときに系が十分平衡に達したかをちゃんと確かめるのは難しい。非平衡状態から平衡状態へ移るときに何が起っているのかよくわからない。そもそも非平衡状態とは何だ？それより平衡状態こそなんだろう？当日は熱力学がよくわかる方とそのあたりをディスカッションしたいと考えている。