

散逸粒子動力学シミュレーションによる 両親媒性分子超分子構造の解明

核融合科学研究所 理論・シミュレーション研究センター 中村 浩章¹
京都工芸繊維大学 繊維学部 藤原 進

1 はじめに

両親媒性分子の集合体構造の振舞いを調べるために、近年開発された散逸粒子動力学 (DPD) シミュレーション [1, 2, 3, 4, 5] を用いる。従来行われている全原子分子動力学 (all-atom MD) シミュレーションでの計算限界は 10 ns、10 nm である。しかし両親媒性分子の超分子構造のダイナミクスは、それらより大きな時空間での振舞いになるため、all-atom MD シミュレーションでは不十分である。そこで、MD の粗視化にあたる DPD シミュレーションを用いる。

この DPD シミュレーションを用いた両親媒性分子の超分子構造ダイナミクスの研究は、我が国でも行われている。例えば、溶媒中の理想化した両親媒性分子の集団は、ランダムもしくは2つの平面状の二分子膜状態を初期条件から、一つのベシクルを構成するようなシミュレーションが、山本達により行われている [6, 7]。これにより、超分子構造形成シナリオを調べることができるようになった。

本発表では、メソスケールでの両親媒性分子の超分子構造の振舞いとして古くから知られているヘキサエチレングリコールデシルエーテル (C₁₂E₆) の相図 [8] の解明を行うため、DPD シミュレーションを用いて行う。この系の DPD シミュレーションは、Jury 達により行われており、実験で分かっている相図を部分的に再現をしている [9]。本発表では、DPD シミュレーションを用いて、相図のより広い部分の再現を目指す。

2 計算アルゴリズム

両親媒性分子を構成する原子、および、溶媒分子数個を一つの粒子として粗視化して扱う。この粗視化粒子は質量が同じであると仮定する。このように選んだ粒子の古典運動方程式を、速度ベルレ法で数値積分し解いていく。粒子 i に働く力 $\vec{f}_i$ を次のように仮定する。

$$\vec{f}_i = \sum_{j \neq i} (\vec{F}_{ij}^C + \vec{F}_{ij}^R + \vec{F}_{ij}^D + \vec{F}_{ij}^S), \quad (1)$$

ここで、 $\vec{F}_{ij}^C$ は保存力、 $\vec{F}_{ij}^R$ はランダム力、 $\vec{F}_{ij}^D$ は散逸力を各々表す。これらは、粒子 i と粒子 j の二体間力であることが、特徴である。さて、さらにこれらの力は具体的には、以下のごとくかける。なお、 $\vec{r}_{ij} \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_j$ 、さらに、 $r_{ij} \equiv |\vec{r}_{ij}|$ 、 $\vec{e}_{ij} \equiv \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ と定義する。また、カットオフとして R_C を導入する。

$$\vec{F}_{ij}^C = \begin{cases} -a_{ij}(1 - r_{ij}/R_C)\vec{e}_{ij} & \text{if } r_{ij} < R_C, \\ 0 & \text{if } r_{ij} \geq R_C, \end{cases} \quad (2)$$

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma w(r_{ij})\vec{r}_{ij}\zeta/\sqrt{\delta t}, \quad (3)$$

$$\vec{F}_{ij}^D = -\frac{1}{2kT}\sigma^2 w(r_{ij})^2 (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}) \vec{r}_{ij}, \quad (4)$$

¹E-mail: nakamura@tcsc.nifs.ac.jp

ここで、関数 $w(r)$ は以下の式で書ける。

$$w(r) = \begin{cases} (1-r) & \text{if } r < R_C, \\ 0 & \text{if } r \geq R_C, \end{cases} \quad (5)$$

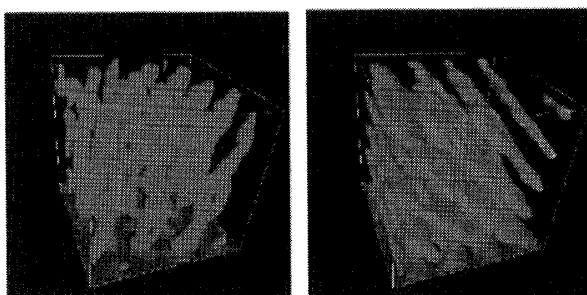
さらに、両親媒性分子内で、隣接粒子間には以下のような束縛力が働く。

$$\vec{F}_{ij}^S = a_k(r_{ij} - r_0)\vec{e}_{ij} \text{ if } i \text{ is connected to } j. \quad (6)$$

以上を用いて計算する。尚境界条件としては、周期境界を用いる。

3 計算結果

非イオン界面活性剤の $C_{12}E_6$ を、溶媒（水）中にランダムに配置した初期状態から計算を始める。また、速度については、各粒子には、系の温度に相当するマクスウェル分布を満たすように与える。最終的に得られる系の超分子構造は、 $C_{12}E_6$ の濃度、そして、系の温度に応じて、時間発展する。例えば、 $C_{12}E_6$ の濃度が 50 % の場合にはヘキサゴナル構造、65 % ではラメラ構造を得た (右図)。これは実験的に得られた相図と一致する。



図：モデル化した両親媒性分子 ($C_{12}E_6$) の濃度による形態（相）の変化溶媒と溶質の質料比が、50 %（左）の時ヘキサゴナル相になり、65 %（右）は、ラメラ相になる

謝辞

本研究をすすめるにあたり、東大生産研田中肇教授には、貴重なアドバイスを数多く頂きました。感謝申し上げます。

参考文献

- [1] P. J. Hoogerbrugge and J. M. V. A. Koelman, Europhys. Lett. **19**(1992), 155.
- [2] J. M. V. A. Koelman and P. J. Hoogerbrugge, Europhys. Lett. **21**(1993), 363.
- [3] R. D. Groot and P. B. Warren, J. Chem. Phys. **107**(1997), 4423.
- [4] R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys. **108**(1998), 8713.
- [5] R. D. Groot and K. L. Rabone, Biophys. J. **81**(2001) 725.
- [6] S. Yamamoto, Y. Maruyama, and S. Hyodo, J. Chem. Phys. **116** (2002)5842.
- [7] Erratum: S. Yamamoto, Y. Maruyama, and S. Hyodo, J. Chem. Phys. **117** (2002)2990.
- [8] D. J. Mitchell, et al., J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1, **79** (1983)975.
- [9] S. Jury, et. al, Phys. Chem. Chem. Phys. **1**(1999),2051.