

分子集合系における物質分配機能の MD と溶媒和理論による全原子解析

Extended Concept of Solvation

toward Unified Treatment of Partitioning Functions of Molecular Aggregates

大阪大学 基礎工学研究科 化学工学領域 松林 伸幸

溶ける／溶けないは日常生活での感覚であり、溶質や溶媒の概念は、多くの人に馴染み深い。溶液中の少数成分である溶質は、主要成分である溶媒に囲まれる。これが溶媒和であり、溶質－溶媒相互作用を通して、溶媒中での溶質の安定性が規定される。周囲の分子集団との相互作用による安定性変化という観点で似たような現象は無数にある。例えば、ミセルによる可溶化では、ミセルに取り込まれる分子は界面活性剤に囲まれ、界面活性剤などとの相互作用を通して取り込まれやすさが決定される。

似たような現象は、共通の概念や理論形式で取扱うことが望ましい。溶液・ミセル・脂質膜・タンパク質・ポリマーのような分子集合系に対する異種分子の結合や取り込みを溶媒和として統一的に理解することが、本研究の目的である。そのために、溶質と溶媒の概念を拡張する。混合過程の前後に変わらず存在する成分を溶媒と呼び、混合後のみに対象系にある成分を溶質と呼ぶ。上に述べたミセルの場合、取り込まれる分子が溶質、界面活性剤と水が溶媒となる。ここでの溶媒は混合溶媒でありナノレベルでは不均一である。多様なソフト分子集合系における物質分配を、均一または不均一な（混合）溶媒における溶媒和という枠の中で解析できる。

物質分配の分子レベル解析では、どれだけ多く取り込まれるか（結合量）、および、どこに取り込まれるか（結合サイト）の2つの問題が重要である。溶液系における取り込み量は溶媒和自由エネルギーで決まり、また、結合サイトは、溶質挿入をある特定のサイトに限定するという条件付きの「溶媒和」に関わる自由エネルギーを考えることでアプローチできる。前段落で溶媒和概念の拡張について述べたが、本研究では、この意味での溶媒和の自由エネルギーを解析している。

自由エネルギーは非常に計算コストの高い量として悪名高い。分子シミュレーション (MD) が可能とされる場合でも、構造がよい精度で計算可能という意味であり、自由エネルギー計算は難しいことが多い。講演者は、自由エネルギー解析のために、エネルギー表示の溶液分布関数理論を定式化しそれを MD と組み合わせている。自由エネルギー計算が飛躍的に高速化されるだけでなく、拡張型の溶媒和現象を統一的な枠組みの中で解析できるようになった。

講演では、考え方を紹介し、次に示す代表的適用例について論じたい。

- a) タンパク質構造に対する共溶媒効果とそれに基づく凝集阻害指針の策定
- b) 脂質膜やミセルへの分子の分配と水の役割
- c) ポリマー系における小分子の吸収および相溶性判定
- d) 固／液界面における吸着自由エネルギーの計算と結晶形状の制御